

Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique

Université Hassiba Benbouali de Chlef

Faculté de Technologie

Département de Génie Mécanique



# THÈSE

Présentée pour l'obtention du diplôme de

## DOCTORAT

Filière : Génie Mécanique

Spécialité : Mécanique Énergétique

Par

**CHAFIK BENSALEM**

Thème :

---

### **MODÉLISATION DU MÉLANGE DIPHASIQUE ET DE LA STRUCTURE DE LA FLAMME TURBULENTE : APPLICATION À UN INJECTEUR CRYOTECHNIQUE**

---

Soutenue le 28/11/2020, devant le jury composé de :

Mohamed MENDAS	Professeur	Université H.B de Chlef	Président
Mohamed Nadjib BOUAZIZ	Professeur	Université Y.F de Médéa	Examineur
Abdelkrim LIAZID	Professeur	Université A.B.B de Tlemcen	Examineur
Ali KHELIL	Professeur	Université H.B de Chlef	Examineur
Soumia KOUADRI MOSTEFAI	Professeur	Université H.B de Chlef	Examineur
Abdallah BENAROUS	Professeur	Université S.D de Blida	Directeur de thèse

## *Dédicaces*

*C'est avec joie que je dédie le fruit de mon travail*

*A la meilleure mère du monde ma chère maman, pour ses encouragements, soutiens et ses prières pour que je réussisse dans mes études et ma vie, merci mère.*

*A mon très cher père, pour ses encouragements, son soutien, surtout pour son sacrifice afin que rien n'entrave le déroulement de mes études, merci père.*

*Je dédie également cette thèse à mes frères "Adel, Fouad" et mes sœurs "Fatima, Chérine" qui ont été toujours là quand il le fallait.*

*A ma chère femme pour sa patience, son aide et son soutien.*

*A mon meilleur ami Bassam Muthana pour tous les moments de joies et de peines qu'on a passés ensemble.*

*Je n'oublierai jamais tous mes professeurs de l'université de Boumerdès, surtout Mr Bettayeb Mourad, qui m'ont appris avec cœur ce que j'ai acquis comme savoir.*

## Remerciements

Louange tout d'abord à dieu qui m'a donné le savoir, la sagesse et la volonté pour réaliser ce travail.

Ce travail a été réalisé au laboratoire de recherche Contrôles, Essais, Mesures et Simulations Mécaniques (LCEMSM) de l'université Hassiba Benbouali de Chlef. Je tiens à remercier toutes les personnes de ce laboratoire.

Toutes mes infinies gratitudee à Monsieur BENAROUS Abdallah, Professeur à l'université Saad Dahleb de Blida et Enseignant-Chercheur au laboratoire LCEMSM pour avoir accepté de diriger ce travail avec beaucoup d'attention, pour ses précieux conseils, pour sa disponibilité et son aide qui ont balisé la voie de ce travail.

J'exprime mes sincères remerciements à Monsieur Mendas Mohamed, Professeur à l'Université Hassiba Benbouali de Chlef pour avoir accepté de présider le jury d'examen de cette thèse.

Je remercie également très sincèrement Monsieur Liazid Abdelkrim, Professeur à l'Université Abou-Bakr Belkaid de Tlemcen, pour avoir fait partie du jury d'expertise.

Que Messieurs, Bouaaziz Mohamed Nadjib, Professeur à l'Université Dr Yahia Farès de Médéa et Khelil Ali, Professeur à l'Université Hassiba Benbouali de Chlef, Ainsi Madame Kouadri Mostefai Soumia, Professeur à l'Université Hassiba Benbouali de Chlef puissent trouver ici toute la gratitude que je souhaite leur exprimer pour les efforts qu'ils ont développé pour examiner et expertiser le travail de cette thèse.

Enfin je remercie tous ceux qui ont contribué de près ou de loin à l'élaboration de ce travail, trouvent ici l'expression de mes profondes gratitudee et respects.

## Résumé

L'injection et le mélange des propergols cryogéniques du moteur fusée sont très complexes dans des conditions quasi critiques et supercritiques. Lorsque l'état supercritique est atteint, faisant disparaître la distinction entre liquide et gaz. La description concise et les mesures fiables de ces flux sont encore discutables. Dans ce contexte, le présent projet de thèse consiste en une contribution vers la modélisation et l'analyse d'un ensemble de configurations d'injection cryogénique en régime trans- et supercritique. L'étude Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) est réalisée pour une injection de l'azote liquide  $LN_2$  dans un environnement d'azote gazeux  $GN_2$  et pour une injection coaxial du couple oxygène/hydrogène ( $LOx/GH_2$ ) avec une description Eulérienne. Une analyse thermodynamique approfondie du comportement du gaz réel a permis de prédire la masse volumique sur la plage expérimentale avec l'utilisation de plusieurs équations d'état (EoS). Les calculs sur l'injection du  $LN_2$  ont été effectués en utilisant à la fois des conditions de température adiabatique et constante pour la paroi de l'injecteur où le transfert de chaleur interne dans l'injecteur du  $LN_2$  a eu un effet significatif sur la distribution de la masse volumique du jet et donc sur la dynamique globale de l'écoulement. Les résultats numériques concernant les profils axiaux de masse volumique pour l'injection  $LN_2$  et  $LOx/GH_2$  avec utilisation d'une loi de comportement de type gaz réel (EoS) concordent assez bien avec les données numériques et expérimentales fournies par la littérature. Par conservation du rapport de mélange par rapport aux données expérimentales et le cas non réactif du  $LOx/H_2$ , des calculs volumes finis sont entrepris pour la combustion non-prémélangée avec des modèles de combustion tabulé de type PDF (fonction densité de probabilité) et FLT (flammelettes). Les résultats relatifs à la température de flamme, radical hydroxyle OH et la structure de flamme de forme générale présentent un comportement acceptable par rapport aux résultats numériques et expérimentaux disponibles pour les mêmes conditions supercritiques.

**Mots-clés :** Régime supercritique, Equations d'état, Gaz réel, Injection  $N_2$  cryogénique, Transfert de chaleur, Ecoulements diphasiques, banc d'essai Mascotte, Combustion d' $O_2/H_2$ .

## Abstract

The injection and mixing of cryogenic rocket engine propellants are very complex under near-critical and supercritical conditions. At the supercritical state, the distinction between liquid and gas disappear. The concise description and reliable measurements of these flows are still questionable. In this context, this thesis project consists of a contribution towards the modeling and analysis of a set of cryogenic injection configurations at trans- and supercritical conditions. The Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) study is carried out for an injection of liquid nitrogen  $LN_2$  in an environment of gaseous nitrogen  $GN_2$  and also for a coaxial injection of the oxygen / hydrogen couple ( $LOx / GH_2$ ) with an Eulerian description. A thorough thermodynamic analysis of the behavior of the real gas

allowed predicting the density over the experimental range with the use of several equations of state (EoS). Calculations on LN<sub>2</sub> injection were performed using both adiabatic and constant temperature conditions for the injector wall where the internal heat transfer in the LN<sub>2</sub> injector had a significant effect on the distribution of the jet density and therefore on the overall dynamics of the flow. The numerical results concerning the axial density profiles for LN<sub>2</sub> and LOx / GH<sub>2</sub> injection using a real gas equation of state (EoS), agree quite well with the numerical and experimental data provided by the literature. With conservation of mixture ratio as the experimental data and the non-reactive case of LOx/H<sub>2</sub>, finite volume calculations are undertaken for non-premixed combustion with tabulated combustion models like PDF (probability density function) and FLT (flammelets) models. The results relating to the flame temperature, OH mass fraction and the flame structure, which in general show an acceptable shape compared to the numerical and experimental results available for the same supercritical conditions.

**Keywords:** Supercritical regime, Equations of state, Real gas, Cryogenic N<sub>2</sub> injection, Heat transfer, Two-phase flows, Mascotte test bench, O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> combustion.

## الملخص

يعتبر حقن ومزج الوقود الدافع لمحركات الصواريخ أمرًا معقدًا للغاية في ظل ظروف تدعى بالحرارة حيث ان عند الوصول إلى الحالة فوق الحرارة لا يمكن التمييز بين السائل والغاز. لا يزال الوصف المختصر والقياسات الموثقة لهذه التدفقات موضع تساؤل. في هذا السياق يتكون مشروع الأطروحة هذا من مساهمة في نمذجة وتحليل مجموعة من تكوينات الحقن المبردة في ظروف قرب وفوق الحرارة. يتم إجراء دراسة RANS لحقن النيتروجين السائل LN<sub>2</sub> في بيئة النيتروجين الغازي GN<sub>2</sub> وللحقن المتحد المحور لثنائي الأوكسجين / الهيدروجين (LOx/GH<sub>2</sub>) مع وصف أويلريان. سمح التحليل الديناميكي الحراري الشامل لسلوك الغاز الحقيقي بالتنبؤ بالكثافة على النطاق التجريبي باستخدام عدة معادلات للحالة (EoS). تم إجراء الحسابات على حقن LN<sub>2</sub> باستخدام الظروف التالية: جدار الحاقن غير ناقل للحرارة و جدار بدرجة حرارة ثابتة حيث كان لانتقال الحرارة الداخلية في حاقن LN<sub>2</sub> تأثير معتبر على توزيع كثافة المائع وبالتالي على الديناميكية العامة للتدفق. النتائج العددية المتعلقة بالكثافة على طول المحور لحقن LN<sub>2</sub> و LOx/GH<sub>2</sub> باستخدام معادلة الغاز الحقيقي للحالة (EoS)، تتفق جيدًا مع البيانات العددية والتجريبية المقدمة من الببليوجرافيات. من خلال الحفاظ على نسبة المزج مقارنة بالبيانات التجريبية والحالة غير التفاعلية لثنائي LOx/H<sub>2</sub> ، يتم إجراء حسابات الحجم المحدودة للاحتراق غير المختلط بالاعتماد على نماذج الاحتراق المجدولة لـ (PDF) و (FLT). النتائج المتعلقة بدرجة حرارة اللهب وجذر الهيدروكسيل OH وبنية اللهب بشكل العام تظهر سلوكًا مقبولًا مقارنة بالنتائج العددية والتجريبية المتوفرة لنفس الظروف فوق الحرارة.

## الكلمات المفتاحية

الحالة فوق الحرارة، معادلات الحالة، الغاز الحقيقي، حقن N<sub>2</sub> المبرد، نقل الحرارة، التدفقات ثنائية الحالة، منضدة الاختبار Mascotte ، احتراق الثنائي O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>.

# Table des matières

Liste des figures

Liste des tableaux

Nomenclature

<b>Introduction générale</b> .....	01
<b>Chapitre 01 : Eléments de moteur fusée</b>	
1.1. Introduction .....	04
1.2. Contexte historique de la propulsion civile .....	04
1.3. Les systèmes propulsifs spatiaux .....	04
1.3.1. Moteur fusée à ergol liquide .....	06
1.3.2. Les ergols .....	07
1.3.3. Le système d'alimentation .....	08
1.3.4. Le système d'injection .....	09
1.3.5. La chambre de combustion .....	11
1.3.6. Fonctionnement des moteurs fusée cryotechniques .....	14
1.4. Conclusion .....	15
<b>Chapitre 02 : Thermodynamique des ergols et analyse bibliographique</b>	
2.1. Introduction .....	17
2.2. La thermodynamique des ergols .....	17
2.2.1. Ecart au comportement d'un gaz parfait .....	18
2.2.2. Modifications des propriétés d'une substance pure près du point critique .....	20
2.2.3. Loi des états correspondants et facteur acentrique .....	23
2.2.4. Cas d'un mélange d'espèces .....	25
2.3. Analyse bibliographique .....	26
2.3.1. Travaux expérimentaux .....	26
2.3.2. Etudes numériques .....	37
2.4. Conclusion .....	43
<b>Chapitre 03 : Modélisation de l'écoulements des ergols et thermodynamique du mélange</b>	
3.1. Introduction .....	44
3.2. Modèles dynamique .....	46
3.2.1. Equations gouvernantes et moyennement .....	46
3.3. Modèle pour le taux de mélange d'ergols .....	50
3.4. Modèles thermodynamiques .....	50

3.4.1. Modélisation d'un fluide parfait .....	51
3.4.2. Modélisation d'un fluide réel .....	51
3.5. Modélisation dynamique et thermique de la phase liquide .....	55
3.5.1. Fragmentation et atomisation d'un jet liquide .....	55
3.5.2. Modélisation de l'atomisation primaire .....	57
3.5.3. Modélisation de l'atomisation secondaire .....	58
3.5.4. Modélisation de la vaporisation .....	61
3.6. Modèles de combustion .....	62
3.6.1. Le couplage chimie-turbulence .....	65
3.7. Conclusion .....	73
<b>Chapitre 04 : Etude de cas, Simulations et discussions</b>	
4.1. Introduction .....	75
4.2. Approche monophasique en gaz réel et calculs des nombres caractéristiques .....	75
4.3. Analyse thermodynamique de la masse volumique .....	79
4.3.1. Cas du nitrogène (N <sub>2</sub> ) comme fluide pur .....	79
4.3.2. Cas du couple cryogénique LOx/GH <sub>2</sub> .....	80
4.4. Analyse CFD de l'injection du N <sub>2</sub> supercritique .....	82
4.5. Analyse CFD de l'injection du LOx/GH <sub>2</sub> ('Cold flow') .....	90
4.6. Analyse CFD de la structure de flamme O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> ('Hot fire') .....	95
4.7. Conclusion .....	102
<b>Conclusions et perspectives</b> .....	103
<b>Bibliographie</b> .....	106
<b>Annexe A : Bancs d'essai</b>	
A.1. Les bancs d'essai .....	117
A.1.1 Le banc d'essai M51 .....	118
A.1.2 Le banc d'essai M3 .....	120
A.1.3 Le banc d'essai P8 .....	120
A.1.4 Le banc d'essai Mascotte .....	121
A.2. Schéma réactionnel du mécanisme O Conaire .....	123

## Liste des figures

1.1	Moteur cryotechnique .....	07
1.2	Système d'alimentation à réservoirs pressurisés .....	08
1.3	Système d'alimentation à turbopompe .....	09
1.4	(a) Types d'injecteurs utilisés dans des moteurs fusées ; (b) injecteur coaxiale .....	10
1.5	Schématisme de la combustion dans un foyer LO <sub>x</sub> /GH <sub>2</sub> .....	11
1.6	(a) Moteur cryotechnique Vulcain 2 et un schéma de son principe de fonctionnement (b) .....	13
1.7	Moteurs cryotechniques HM-7B et Vulcain 2 .....	15
2.1	Représentation dans l'espace ( $V, T$ et $P$ ) du diagramme de stabilité d'un corps pur .....	17
2.2	Diagramme de phase d'un corps pur .....	18
2.3	Facteur de compressibilité d'une substance pure en fonction de la pression réduite et de la température réduite .....	20
2.4	Ligne de pseudo-ébullition .....	21
2.5	Masse volumique, capacité calorifique, viscosité et conductivité thermique (de l'oxygène pur) pour des températures entre 40 K et 1000 K et des pressions de 1, 10, 50, 100, 200, 400 atm .....	22
2.6	Diffusion d'espèce de l'oxygène pur (a) et de l'hydrogène pur (b) pour des températures entre 40 K et 1000 K et des pressions de 1, 10, 50, 100, 200, 400 atm .....	22
2.7	Evolution des pressions et température critiques en fonction du nombre de carbones dans C <sub>n</sub> H <sub>2n+2</sub> .....	23
2.8	Illustration du principe des états correspondants appliqué au méthane et à l'azote. Cercles creux : méthane. Cercles pleins : azote .....	24
2.9	Courbes d'équilibre liquide-vapeur pour un fluide réel et un fluide obéissant à la loi des états correspondants ("Model Fluid") .....	24
2.10	(a) Locus des points critiques dans le cas d'un mélange binaire ; (b) Evolution de la température critique et de la pression critique du mélange H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> en fonction de la fraction molaire d'oxygène (calculé à partir de l'équation de Van Der Waals) .....	25
2.11	Visualisations du jet central N <sub>2</sub> entouré d'un jet annulaire He. (a) pression de la chambre sous-critique de 1 MPa. (b) pression de chambre supercritique de 6 MPa .....	28
2.12	Evolution d'un jet cryogénique de N <sub>2</sub> dans une atmosphère de N <sub>2</sub> au repos avec le rapport de pression $P/P_c$ .....	29
2.13	Image instantanée de l'émission d'OH* d'une flamme cryogénique H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> à 6,3 MPa .....	32

2.14	Images du champ moyen et transformées d'Abel d'une flamme cryogénique H <sub>2</sub> /O <sub>2</sub> à 6 MPa .....	32
2.15	Diagrammes de la structure de la flamme. (a) en dessous de la pression critique d'oxygène ; (b) au-dessus de la pression critique d'oxygène .....	33
2.16	OH-PLIF d'une flamme transcritique LOx / GH <sub>2</sub> à 6,3 Mpa .....	33
2.17	Émissions OH* de transformation d'Abel. Image agrandie du voisinage de la lèvre de l'injecteur .....	34
2.18	Image OH-PLIF de la région d'ancrage. Le flux de H <sub>2</sub> (O <sub>2</sub> ) est au-dessus (ou en dessous) de la plaque de séparation à 6,3 MPa .....	34
2.19	Les différentes zones d'un flux de jet .....	35
2.20	Masse volumique sur l'axe centrale .....	36
2.21	Langueur du cœur dense .....	37
2.22	Champs instantanés de (a) fraction massique d'hydrogène et (b) d'oxygène, avec fraction de mélange stœchiométrique superposée isoline (noir) .....	40
2.23	Configurations de flux à différentes valeurs de $\psi$ .....	41
2.24	Champ instantané de l'émission du radical OH*, Concentration du radical OH des calculs CFD ; (a) diffusion différentielle dans la zone de flamme (b) Nombre de Lewis $Le_i = 1$ ...	42
2.25	Concentration du radical OH, (haut) Expérimental, (bas) Simulation .....	42
3.1	Phénomènes intervenant lors de la combustion en milieu diphasique .....	45
3.2	Illustration de l'atomisation primaire et secondaire .....	56
3.3	Schématisation des mécanismes d'atomisation primaire .....	58
3.4	Evolution du nombre de Weber critique .....	59
3.5	Illustration des divers modes de cassure d'une goutte .....	60
3.6	Représentation schématique des différents régimes de combustion turbulente non prémélangée .....	65
3.7	Allure générale d'une fonction spéciale de type Beta (avec ses paramètres) .....	70
3.8	Schématisation d'une flammelette de diffusion (à contre-courant) laminaire .....	71
4.1	(a) Masse volumique d'azote en fonction de la température statique (P = 3,97 MPa); (b) zoom sur la plage de température d'injection .....	80
4.2	Masse volumique de l'oxygène (O <sub>2</sub> ) en fonction de la température statique (P = 6 MPa) ..	81
4.3	Masse volumique de l'hydrogène H <sub>2</sub> en fonction de la température statique (P = 6 MPa) .	81
4.4	Courbe 3D de la masse volumique du mélange O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> en fonction de température et la fraction molaire de l'O <sub>2</sub> (P = 6 MPa) .....	82

4.5	(a) Banc d'essai M51 ; (b) Représentation de l'injecteur et son manifold .....	83
4.6	(a) Géométrie du domaine de calcul ;(b) Aperçu du modèle d'injecteur .....	84
4.7	(a) Maillage du domaine de calcul ; (b) Analyse de sensibilité de la grille pour la masse volumique sur l'axe .....	84
4.8	Distribution de la vitesse axiale du N <sub>2</sub> le long de l'injecteur .....	85
4.9	Distribution de la masse volumique sur l'axe (cas adiabatique, $T_{inlet} = 120,9$ K, $P = 3,97$ MPa) .....	86
4.10	Distribution de la masse volumique sur l'axe ( $T_{inlet} = 120,9$ K, $P = 3,97$ MPa) .....	87
4.11	Distribution de la masse volumique sur l'axe à l'intérieur de l'injecteur ( $T_{inlet} = 120,9$ K, $P = 3,97$ MPa) .....	87
4.12	Contours de masse volumique pour les cas, isotherme (en haut) et adiabatique (en bas) pour les parois de l'injecteur .....	88
4.13	Comparatif des longueurs de cœur dense du jet N <sub>2</sub> en sortie de l'injecteur coaxial .....	89
4.14	(a) Géométrie du domaine de calcul RCM3-A60 ; (b) Dimensions de l'injecteur coaxial ..	90
4.15	(a) Maillage du domaine de calcul ; (b) Analyse de sensibilité de la grille pour la masse volumique en sortie d'injecteur .....	91
4.16	Profil radial de la température en sortie d'injecteur .....	92
4.17	Contour de la température statique (mélange LOx/ GH <sub>2</sub> , SRK) .....	92
4.18	Profils de vitesse axiale par rapport au calcul CFD de Cheng .....	93
4.19	Profils de la masse volumique sur l'axe ( $r/D_{ox} = 0$ ) .....	93
4.20	(a) Profils de masse volumique sur la station axiale ( $x/L_{inj} = 1$ ) .....	94
4.21	(a) Profils de la fraction de mélange sur l'axe ( $r / D_{ox} = 0$ ) ; (b) Fraction de mélange stœchiométrique ( $Iso-f_{st}$ ) .....	94
4.22	Géométrie du domaine de calcul RCM3-A60 .....	95
4.23	Température moyenne en fonction de la fraction de mélange $f$ selon les tables PDF et FLT	96
4.24	Fraction massique des espèces majeures (a) et espèces mineures (Table FLT) .....	96
4.25	La masse volumique du mélange sur l'axe ( $r / D_{ox} = 0$ , PDF) .....	97
4.26	Comparaison des contours de température (a) Gas parfait – flammelettes parfait ; (b) en haut gas réel – flammelettes parfait, en bas gas réel – flammelettes réel ; (c) en haut FLT model, en bas PDF model .....	98
4.27	(a) Aperçu du contour de température sur la zone d'injection ; (b) Contours de température avec les modèles EDM et flammelettes .....	99
4.28	Température moyenne de flamme sur l'axe ( $r / D_{ox} = 0$ ) .....	99

4.29	Distribution spatiale de la fraction du mélange stœchiométrique ( $Iso-f_{st}$ ) et la température de flamme ( $T_{st}$ ) .....	100
4.30	Contours de la fraction massique du OH .....	100
4.31	Profils de la fraction massique du OH sur l'axe central ( $r/D_{ox} = 0$ ) .....	100
4.32	Comparaison des contours de la fraction massique du OH, (a) gaz réel – flammelettes réel ; (b) Images du champ moyen et transformées d'Abel d'une flamme cryogénique $H_2/O_2$ ; (c) en haut FLT modèle, en bas PDF modèle .....	101
A.1	Banc P5 au DLR	118
A.2	Banc Mascotte	118
A.3	Banc d'essai M51 (a). Dimensions de l'injecteur (b)	119
A.4	Domaine de fonctionnement du banc d'essai M3, P8 et Mascotte	120
A.5	Banc d'essai M3	120
A.6	Chambre de combustion P8	121
A.7	Visualisation du banc Mascotte en fonctionnement (a) point RCM2-A10. (b) RCM3-A60	122
A.8	Géométrie du banc Mascotte	123
A.9	Géométrie de l'injecteur coaxial pour le point de fonctionnement Mascotte A-60	123

## Liste des tableaux

1.1	Caractéristiques techniques des moteurs cryotechniques HM-7B, Vulcain 2 et Vinci .....	15
2.1	Coordonnées de points critiques, compressibilité ( $Z_c$ ) et facteur acentrique ( $\omega$ ) .....	25
4.1	Nombres et temps caractéristiques de l'écoulement pour le cas RCM1-A .....	77
4.2	Nombres et temps caractéristiques de l'écoulement pour le cas RCM3-A60 .....	78
4.3	Conditions opératoires de l'injection $LN_2/GN_2$ .....	83
4.4	Conditions opératoires de l'injection $LOx/GH_2$ .....	90
A.1	Points de fonctionnement RCM1-A et RCM1-B du banc d'essai M51 .....	119
A.2	Conditions opératoires du banc d'essai mascotte .....	123

## Nomenclature

$A$	section	$m^2$
$a, a_0, A, b, B, c$	coefficients d'équation d'état	
$b^{(0)}$	second coefficient du Viriel	$m^3.mole^{-1}$
$C, C_g, C_d$	constants	
$C^*$	vitesse caractéristique	$m.s^{-1}$
$C_F$	coefficient de de poussée adimensionnel	
$C_{1\varepsilon}, C_{2\varepsilon}, C_{3\varepsilon}, C_\mu$	constantes du modèle de turbulence	
$C_{MAG}$	constante du modèle de Magnussen	
$C_p$	capacité calorifique à pression constante	$Joule.kg^{-1}.K^{-1}$
$C_v$	capacité calorifique à volume constant	$Joule.kg^{-1}.K^{-1}$
$D, d$	diamètre de l'injecteur, de la goutte / de la molécule	$m$
$D_i, D_{ij}$	coefficient de diffusion massique	$m^2.s^{-1}$
$e$	épaisseur de la couche de mélange	
$f$	fraction de mélange	
$F_i$	flux de diffusion de l'espèce $i$ dans le mélange	
$g$	accélération de la pesanteur au sol	$m.s^{-2}$
$G$	enthalpie libre de Gibbs	$Joule$
$G_k$	taux de production de l'énergie cinétique turbulente	$kg.m^{-1}.s^{-3}$
$H(h), hf$	enthalpie, enthalpie de formation	$Joule.kg^{-1}$
$I$	intensité de turbulence (%)	
$I$	impulsion	$m.s^{-1}$
$J$	rapport de quantité de mouvement	
$K$	taux de vaporisation	$m^2.s^{-1}$
$k$	énergie cinétique de turbulence	$m^2.s^{-2}$
$L$	chaleur latente de changement d'état	$Joule.K^{-1}$
$L_{inj}, L_f$	longueur d'injecteur / de flamme	$m$
$Le$	nombre de Lewis	
$M$	masse molaire	$g.mole^{-1}$

$M_0$	masse totale initiale de la fusée	kg
$M_F$	masse totale finale de la fusée	kg
$\dot{m}$	débit massique	kg.s <sup>-1</sup>
$n$	fonction du facteur acentrique	
$N$	nombre total d'espèces chimiques	
$p$	pression statique	Pa
$\tilde{P}$	fonction densité de probabilité de Favre	
$P_k$	taux de production de l'énergie cinétique turbulente $k$	kg.m <sup>-1</sup> .s <sup>-3</sup>
$Pr_t$	nombre de Prandtl turbulent	
$Q_i^F$	chaleur de formation d'une espèce chimique	Joule.kg <sup>-1</sup>
$\vec{R}$	résultante des forces	N
$R$	constante des gaz parfaits	Joule.mole <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
$r$	cordonnée spatiale dans la direction radial	m
$r = R/M$	constante massique du gaz parfait	Joule.g <sup>-1</sup> .K <sup>-1</sup>
$R_m = o/f$	rapport de mélange	
$S_{li}$	composante de la partie antisymétrique du tenseur de quantité de mouvement	
$Sc_t$	nombre de Schmidt turbulent	
$s$	coefficient stœchiométrique massique	
$t$	temps	s
$T$	température statique	K
$U, u$	vitesse axiale moyenne	m.s <sup>-1</sup>
$u'_x, u'_y, u'_z$	composantes fluctuantes du vecteur vitesse	m.s <sup>-1</sup>
$v$	module du vecteur de vitesse	m.s <sup>-1</sup>
$V$	volume	m <sup>3</sup>
$W_{ij}$	composante de la partie symétrique du tenseur de quantité de mouvement	
$x$	cordonnée spatiale dans la direction axial depuis l'entrée d'injecteur	m
$X$	cordonnée spatiale dans la direction axial depuis l'entrée de la chambre	m

$X_i$	fraction molaire d'une espèce chimique
$Y_i$	fraction massique d'une espèce chimique $i$
$Z$	coefficient de compressibilité

### Lettres grecques

$\alpha, \beta$	coefficients	
$v$	volume molaire	$\text{m}^3.\text{mol}^{-1}$
$\Delta v$	augmentation de la vitesse de l'étage de la fusée	$\text{m}.\text{s}^{-1}$
$\Delta v_G$	perte de vitesse en raison de l'effet gravitationnel	$\text{m}.\text{s}^{-1}$
$\Delta v_A$	perte de vitesse en raison de l'effet aérodynamique	$\text{m}.\text{s}^{-1}$
$\Delta v_C$	perte de vitesse due à l'effet du système de contrôle	$\text{m}.\text{s}^{-1}$
$\delta$	taux de détente	
$\varepsilon$	taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	$\text{m}^2.\text{s}^{-3}$
$\gamma$	coefficient isentropique / fonction de facteur acentrique $\omega$	
$\chi$	terme invariant de Pope	
$\chi_{st}$	scalaire de dissipation $\chi$ à la stœchiométrie ( $f = f_{st}$ )	
$\lambda$	conductivité thermique	$\text{W}.\text{m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$\mu, \mu_t$	viscosité dynamique moléculaire, turbulente	$\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
$\bar{\mu}$	potentiel chimique	$\text{Joule}.\text{mole}^{-1}$
$\omega$	facteur acentrique de Pitzer	
$\omega_i$	taux de production / consommation d'une espèce chimique	$\text{kg}.\text{m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
$\psi$	le rapport de la hauteur des lèvres sur l'épaisseur de la flamme	
$\kappa$	viscosité dynamique due à la compressibilité	$\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
$\rho$	masse volumique	$\text{kg}.\text{m}^{-3}$
$\sigma$	tension de surface	$\text{N}.\text{m}^{-1}$
$\sigma_t$	constant	
$\alpha l$	longueur caractéristique de diffusion	$\text{m}$
$\sigma_k, \sigma_\varepsilon$	nombres de Schmidt pour l'énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation	
$\tau$	tenseur des contraintes visqueuses	$\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-2}$
$\tau_c$	temps caractéristique chimique	$\text{s}$

$\tau_t = k / \varepsilon$  temps caractéristique de turbulence

s

### Indices

<i>a</i>	fait référence aux conditions atmosphériques
<i>b</i>	fait référence à l'état brulé
<i>c</i>	fait référence à l'état critique
<i>cm</i>	propriétés critiques de mélange
<i>ct</i>	valeur sur l'axe central
<i>ch</i>	valeur à la chambre
<i>eb</i>	fait référence à l'ébullition
<i>F</i>	relatif au combustible
<i>g</i>	relatif à la phase gazeuse
<i>h</i>	hydraulique
<i>inj</i>	valeur à l'injection
<i>inlet</i>	l'entrée de l'injecteur
<i>l</i>	relatif à la phase liquide
<i>OX, ox</i>	relatif à l'oxygène liquide / à l'oxydant
<i>m</i>	valeur pour le mélange
<i>max</i>	valeur maximale
<i>p</i>	relatif aux produits de la combustion
<i>r</i>	valeur réduite
<i>sat</i>	fait référence à l'état saturé
<i>st</i>	relatif aux conditions stœchiométriques
<i>t</i>	valeur au col de tuyère
<i>wall</i>	paroi
<i>0</i>	valeur sur l'axe centrale à l'injecteur
$\infty$	valeur limite, loin du jet.

### Exposants

(0)	relatif aux pressions ambiantes, en tuyère adaptée
<i>ext</i>	la limite d'extinction
*	valeur de référence

### Abréviations et acronymes

ARK	Aungier-Redlich et Kwong EoS
CEA	Chemical Equilibrium and Applications
CFD	Computational Fluid Dynamics
DLR	Agence spatiale allemande
DNS	Direct Numerical Simulation
EoS	Equation d'état
EDM	Eddy Dissipation Model
ECA	European Space Agency
FLT	Modèle de flammelettes
GDR	Groupement de Recherche "Combustion dans les moteurs fusées"
IWRCM	International Workshop on Rocket Combustion Modeling
LES	Large Eddy Simulation
LFA	Laminar Flamelet Assumption
LOx	Oxygène Liquide
LRE	Liquide Rocket Engine
MMH	Mono Méthyle Hydrazine (propergol liquide)
NIST	National Institute of Standards and Technology
ONERA	Office National d'Etude et de Recherche Aérospatiales
PLIF / LIF	Fluorescence Induite par Laser Planaire
PDF	fonction densité de probabilité
PR	Peng-Robinson EoS
RANS	Reynolds Averaged Numerical Simulation
SRK	Soave-Redlich et Kwong EoS
SSME	Space Shuttle Main Engine
TFA	Température de Flamme Adiabatique
URANS	Unsteady Reynolds Averaged Numerical Simulation
VWML	Volume Weighted mixing law
<b>Autres</b>	
$g'$	valeur fluctuante au sens de Reynolds de la quantité $g$
$g''$	valeur fluctuante au sens de Favre de la quantité $g$
$\bar{g}$	moyenne de Reynolds de la quantité $g$

$\tilde{g}$  moyenne de Favre de la quantité  $g$

**Nombres sans dimension**

$B$  nombre de transfert de Spalding

$Oh$  nombre d'Ohnesorge

$Re$  nombre de Reynolds

$We$  nombre de Weber

$A(P)$  Nombre de Gelfand

$Da$  Le nombre de Damköhler

$Ka$  Le nombre de Karlovitz

# **Introduction générale**

## Introduction générale

L'aérothermodynamique des systèmes propulsifs est un des domaines de la mécanique des fluides où des progrès décisifs restent à réaliser pour améliorer les performances, afin de satisfaire la demande continue de satelliser des charges utiles de plus en plus lourdes. La propulsion chimique utilisant l'énergie thermique dégagée lors de la combustion des ergols solides ou liquides, demeure l'unique moyen de propulsion permettant de répondre aux exigences des fortes demandes en poussée. Plus spécifiquement, les combinaisons cryogéniques pour les ergols liquides se sont avérées intéressantes, quant à contrôlabilité de la poussée et à l'atténuation des instabilités de combustion. Une meilleure compréhension des processus physiques et chimiques qui se produisent dans les moteurs fusées à ergols liquides est nécessaire pour assurer la stabilité, la fiabilité et l'efficacité lors de leur fonctionnement. La performance de ces moteurs est grandement influencée par la dynamique du mélange au voisinage de l'injecteur. Ces ergols liquides sont stockés à des températures inférieures à 100 K, assurant ainsi, un rapport élevé volume/poids. Les instabilités de combustion ont longtemps été reconnues comme le problème le plus difficile dans le développement de ce type de moteurs. La probabilité d'apparition de ces instabilités est plus élevée lors des basses pressions, pouvant se produire pendant le démarrage et l'arrêt du moteur fusée.

Dans le courant des années 1980, les lanceurs Ariane subirent un certain nombre d'incidents, en partie imputés aux étages cryotechniques. Certains d'entre eux furent notamment provoqués par des instabilités de combustion. Les problèmes rencontrés pendant cette période mirent en évidence le manque de connaissances théoriques à propos des phénomènes physiques à l'œuvre dans les moteurs cryotechniques, ainsi que le besoin en outils numériques capables de simuler leur fonctionnement, améliorer leur fiabilité, et d'une manière générale optimiser leur performance. Dans les années 90, des maquettes (bancs d'essais) en échelles réduites (M51, P8-DLR en Allemagne, Mascotte-ONERA en France) ont été construites pour l'étude de la combustion cryotechnique et répondre aux besoins des expérimentateurs. Celui-ci permet rapidement de conduire des essais représentatifs des conditions réelles de fonctionnement des moteurs-fusée. Faire fonctionner des installations expérimentales, en particulier dans ces conditions extrêmes, coûte très cher. Pour cette raison, la simulation numérique est apparue comme une approche prometteuse pour la compréhension de la physique de combustion des fusées et a pour objectif de devenir un outil de conception clé dans l'industrie. Selon l'effort de modélisation requis, différentes méthodologies de simulation de la dynamique des fluides computationnelle (CFD) peuvent être utilisées pour résoudre l'ensemble d'équations Navier-Stokes réactives compressibles. Les méthodes sont classées comme simulation numérique directe (DNS) où toutes les échelles de turbulence sont résolues, simulation de Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) où seules les variables de débit moyen sont résolues et la turbulence est entièrement modélisée, et Large Eddy Simulation (LES) qui résout le mouvement turbulent des tourbillons résolus sur la taille des mailles, les tourbillons des sous-grilles étant modélisés.

Les régimes d'injection les plus utilisés, s'orientent principalement vers les hautes pressions, basses températures avec une tendance, vers et au-delà, du point critique de la phase liquide. En conséquence, les chambres de combustion cryotechniques sont le siège de phénomènes complexes et couplés, notamment le mélange turbulent diphasique et la compressibilité de l'écoulement. En régime supercritique, les effets de la thermodynamique non-idéale, des variations de propriétés de transport et des corrections de haute pression pour l'équilibre des phases, modifient les mécanismes de vaporisation de manière significative. Ainsi, au voisinage du point critique, il existe un très grand gradient de masse volumique en raison des caractéristiques liquides du fluide. Certaines approches utilisent tout de même des formulations diphasiques pour caractériser l'atomisation primaire, sachant qu'en supercritique, un régime de gouttes n'est pas probable. Ces approches ne semblent pas être très efficaces pour reproduire la structure des flammes diphasiques.

La thermodynamique des ergols joue un rôle important dans la caractérisation de la dynamique du mélange. Au voisinage du point critique ou en trans-critique, le mélange réactif présente une grande variation des propriétés thermodynamiques et de transport, qui affectent drastiquement les processus de mélange et de combustion. Il a été remarqué expérimentalement et vérifié numériquement, que la complexité apparaît au voisinage de l'injecteur, en raison du cisaillement dans la couche de mélange et de la recirculation due à l'accrochage des flammes aux lèvres. En l'occurrence, la masse volumique doit être rigoureusement modélisée via une loi de comportement, fidèle à la thermodynamique des substances pures et au mélange avant combustion et ce, dans le but de mieux pondérer (moyenne de Favre) les variables aérothermochimiques dans les cas réactifs turbulents.

C'est sur la base de cette constatation que ces travaux de thèse ont été initiés. Ils visent à mettre en place une stratégie de couplage entre des modèles bien adaptés à la description de l'écoulement diphasique par le modèle dit "à phase homogène" qui consiste à décrire le mélange comme étant monophasique mais à comportement thermodynamique réel. L'objectif est ainsi d'améliorer la description des écoulements diphasiques dans un environnement non-réactif et réactif pour les conditions réels des moteurs-fusées cryotechniques. Une résolution de type RANS stationnaire est utilisé pour ces calculs numériques qui sont entrepris en formulations volumes finis, par utilisation du solveur commercial Ansys-Fluent®.

Par ailleurs, une tentative de caractérisation numérique a été faite sur l'écoulement de fluide réel de  $N_2$  dans un assemblé chambre-injecteur et injecté dans des conditions trans- au supercritiques. Une attention particulière est portée à l'évolution de la masse volumique au voisinage de la sortie de l'injecteur et de l'axe de la chambre. Les conditions d'injecteur adiabatique et isotherme seront prises en compte avec l'utilisation de différents lois de comportement de type gaz réel (EoS). Les résultats numériques concernant la distribution spatiale de la masse volumique et la longueur du noyau dense seront comparés aux mesures du cas RCM1-A et comparées à certaines valeurs empiriques fournies par des corrélations largement utilisées.

L'injection du couple cryogénique (LOx/GH<sub>2</sub>) suivant le cas test RCM3-A60 est simulé numériquement afin d'analyser l'influence du type d'équation d'état adoptée pour les espèces pures sur la dynamique de l'écoulement et la qualité du mélange, dans le voisinage d'un injecteur coaxial. Trois formulations (PR, SRK, ARK) pour la loi de comportement sont utilisées afin de caractériser le mélange binaire non-réactif, pour lequel les équations gouvernantes sont écrites dans un formalisme Eulérien. Une géométrie assimilable à celle du banc Mascotte est considérée. Cette simulation non-réactive permettra d'initialiser les calculs réactifs avec utilisation des modèles de combustion de type PDF (fonction densité de probabilité) et FLT (flammelettes). La structure de la flamme est étudiée par le biais des champs et profils de température et du radical hydroxyle OH et comparé aux résultats numériques et expérimentale.

Le premier chapitre de cette thèse commence par un aperçu sur l'historique et l'aspect technologique de la propulsion par fusée. Une description détaillée du moteur fusée à propergols liquides (cryogénique) avec les principales composantes (système d'alimentation, système d'injection et chambre de combustion) ainsi que les modes de fonctionnement.

Dans la première partie du deuxième chapitre, une analyse des écarts du comportement du gaz parfait par rapport au gaz réel et les notions de la thermodynamique des fluides cryogéniques dans un régime trans- et supercritique sont exposés. En deuxième partie, une synthèse bibliographique est présentée pour les différentes expériences et simulations numériques des écoulements monophasiques (monergols) et diphasiques (diergols) ainsi que les phénomènes d'atomisation, désintégration, dynamique et structure des flammes.

Le troisième chapitre est dédié à la modélisation de la dynamique de l'écoulement et la thermodynamique des ergols et mélange ainsi aux modèles de combustion (PDF, FLT...). Le modèle dynamique comporte les équations gouvernantes avec la moyenne de Favre. Alors que la thermodynamique des ergols est présentée par les équations d'états et les lois de mélange.

La première partie du quatrième chapitre commence par des calculs estimatifs des temps et nombres caractéristiques de l'écoulement diphasique appliqué aux cas du LN<sub>2</sub>/GN<sub>2</sub> et LOx/GH<sub>2</sub> où l'on justifie l'utilisation d'une approche Eulérienne (sans goutte). Par la suite, les résultats des simulations numériques non-réactives sont interprétés pour l'injection du LN<sub>2</sub>/GN<sub>2</sub> et LOx/GH<sub>2</sub>. En dernier lieu une analyse de la structure de flamme O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> est confrontée aux résultats numériques et expérimentaux pour validation.

# **Chapitre 01**

## **Eléments de moteur fusée**

# 1. Chapitre 01 : Eléments de moteur fusée

## 1.1. Introduction

La conquête de l'espace a toujours été l'un des plus grands rêves de l'humanité et a commencé à devenir réalité dans les années 60, notamment impulsée par la « guerre froide » entre les États-Unis d'Amérique et l'ancienne Union des Républiques Socialistes Soviétiques pour gagner la course vers la lune. Avec la fin de la guerre froide, les efforts se sont concentrés sur le développement de technologies pour la fabrication de systèmes ou de laboratoires de recherche d'intérêt dans les domaines de la physique, la chimie, les matériaux, la médecine, l'agriculture et une centaine de nouveaux phénomènes physiques encore inconnus a été étudiée. Les grandes fusées utilisées comme les lanceurs de satellites assuraient l'insertion de satellites en orbite équatoriale, polaire et en orbite géostationnaire.

## 1.2. Contexte historique de la propulsion civile

Lorsque le premier objet fabriqué par l'homme, la fusée A4, a atteint l'espace en 1942, il a été soutenu par un programme de recherche national en temps de guerre. Spoutnik, le premier homme à avoir lancé un objet en orbite autour de la Terre en 1957, a marqué l'avance de l'Union soviétique dans la course à l'espace de la guerre froide. Les États-Unis ont finalement réussi à gagner la course grâce au "gigantic Apollo program", qui a débarqué deux astronautes sur la lune en 1969. En avant de 2004, Le SpaceShipOne de Burt Rutan est le premier avion commercial à franchir la frontière de l'espace, atteignant ainsi Mach 3. Le premier objet commercial à orbiter autour de la terre (et à rentrer ensuite dans l'atmosphère terrestre) est Elon Musk's Dragon Capsule en 2010. Seulement deux ans plus tard, il s'agit de la première capsule commerciale à accoster avec la Station spatiale internationale. Les deux développements ont été financés par des personnes sans expérience dans le domaine des fusées, Paul Allen de Microsoft et Elon Musk, de PayPal.

## 1.3. Les systèmes propulsifs spatiaux

Les lanceurs spatiaux sont des systèmes propulsifs utilisés pour mettre en orbite terrestre des satellites, mais également pour transporter des sondes et du matériel dans l'espace, pour approvisionner la station spatiale en logistique et transporter des scientifiques. Les missions interplanétaires nécessitent également des fusées de fortes poussées embarquant des quantités très importantes de propergol. Ariane 5G par exemple dispose de 470 tonnes de propergol solide et de 170 tonnes de propergol liquide alors que le lanceur des Etats-Unis Delta IV embarque 627 tonnes de propergol [1].

Un moteur fusée peut être classé principalement selon le type d'énergie stockée (chimique, nucléaire, électrique), sa fonction (booster, contrôle d'altitude, manœuvre orbitale, etc.) et les propergols qu'il utilise. La propulsion d'un lanceur de satellites est assurée essentiellement par des systèmes propulsifs chimiques ; l'énergie interne des gaz brûlés, produits par des réactions chimiques, est transformée en énergie cinétique par la détente dans la tuyère. L'éjection de ces gaz à grande

vitesse, permet d'obtenir une poussée importante qui permet la satellisation de la charge utile transportée et éventuellement une libération de l'attraction gravitationnelle terrestre.

L'énergie nécessaire pour le placement de satellites en orbite est assurée par des systèmes de propulsion utilisant la technologie de propergol solide, liquide ou hybride. Le choix de la technologie dépend du coût, de l'efficacité et de la fiabilité sachant que l'efficacité et la fiabilité sont toujours privilégiées. Les plus utilisés sont les propergols liquides et solides, même si la propulsion hybride connaît un regain d'intérêt ces dernières années car pouvant offrir des vertus essentielles telles que sécurité et simplicité [2]. Les fusées utilisant des ergols liquides sont plus efficaces, car elles offrent une énergie spécifique plus élevée qu'avec des propergols solides, mais nécessitent des précautions et des coûts de fabrication plus élevés. Les moteurs-fusées, utilisant les propergols solides, sont composés essentiellement de l'enveloppe du moteur, i.e. les protections thermiques, le propergol, un système d'allumage et une tuyère. Cette dernière est une cible de recherche dans les domaines des matériaux résistants à des conditions très sévères de fonctionnement.

Les deux grandes branches des systèmes propulsifs chimiques sont les systèmes à propergols solides et les systèmes à ergols liquides. En propulsion 'solide', le matériau énergétique, qui se présente sous forme d'un composé solide (propergol) constitué d'un couple oxydant-combustible, est stocké dans la chambre de combustion. En propulsion 'liquide', les combustibles et comburants considérés (ergols) sont à l'état liquide dans des réservoirs, et sont injectés à haut débit et haute pression dans la chambre de combustion, par l'intermédiaire d'un système d'alimentation.

Parmi les systèmes propulsifs liquides, on distingue les moteurs à ergols stockables, qui utilisent des ergols qui sont liquides à pression et à température ambiante, ce qui permet un stockage aisé dans les réservoirs (comme dans le moteur Aestus de l'étage supérieur du lanceur Ariane 5 qui utilise le couple  $N_2O_4/MMH$ ) ; et les moteurs cryotechniques, où les ergols, gazeux en condition normale de pression et température, sont maintenus à l'état liquides à très basse température (fluides cryogéniques), ce qui complique leur stockage avant le lancement (c'est le cas du moteur Vulcain de l'étage principale d'Ariane 5 utilisant le couple  $LOx/GH_2$ ).

Tsiolkovsky [3] a indiqué que l'accroissement vitesse ( $\Delta v$ ) d'une fusée est directement proportionnel à l'impulsion spécifique du moteur et au rapport entre la masse totale et la masse sans propergol (eq.1.1) :

$$\Delta v = I \cdot \ln \frac{M_0}{M_F} - \Delta v_G - \Delta v_A - \Delta v_C \quad (1.1)$$

avec  $I$  l'impulsion,  $M_0$  la masse totale,  $M_F$  la masse sans propergol,  $\Delta v_G$  les pertes de vitesse liées à la gravité,  $\Delta v_A$  celles liées à l'aérodynamique, et  $\Delta v_C$  celles correspondant au système de contrôle utilisé pour le changement de la direction de la fusée. Les fusées utilisées pour le lancement de satellites sont généralement composées d'environ 82% en+ masse de propergol, de 17% sur la structure et environ 1% seulement correspond à la charge utile. L'impulsion spécifique ou la vitesse de sortie des gaz à

travers la tuyère est le paramètre le plus important puisqu'il permet de mesurer la performance globale d'un moteur-fusée. L'impulsion spécifique [4] s'écrit comme :

$$I = C^* \cdot C_F \tag{1.2}$$

où  $C^*$  la vitesse caractéristique (eq.1.3), qui est un paramètre qui permet d'évaluer l'énergie thermique spécifique du gaz de la combustion du propergol solide et  $C_F$  (eq.1.4) le coefficient de poussée adimensionnel, qui mesure l'efficacité du processus de détente des gaz dans la tuyère :

$$C^* = \frac{\sqrt{R_o \cdot T_o}}{\sqrt{\gamma} \cdot \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}}} \tag{1.3}$$

$$C_F = \sqrt{\frac{2 \cdot \gamma^2}{\gamma-1} \cdot \left(\frac{2}{\gamma+1}\right)^{\frac{\gamma+1}{\gamma-1}} \cdot \left[1 - \left(\frac{P_e}{P_b}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}\right]} + \frac{A_e}{A_t} \cdot \left(\frac{P_e}{P_b} - \frac{P_a}{P_b}\right) \tag{1.4}$$

Les recherches dédiées aux systèmes propulsifs se sont focalisées sur l'obtention d'une impulsion spécifique la plus élevée, en utilisant des matériaux énergétiques les plus efficaces et des matériaux de protection les plus résistants, i.e. offrant des résistances thermique et mécanique optimales. Les phénomènes chimiques et physiques, qui se produisent à l'intérieur de la chambre de combustion et au sein de la tuyère, conditionnent les phases de conception des différents composants en considération des propergols très énergétiques, à haute résistance et utilisant des matériaux à faible densité et à faible conductivité thermique capable de résister à de telles dégradations thermiques.

### 1.3.1. Moteur fusée à ergol liquide

Dans ce qui va suivre, on s'intéressera aux moteurs fusées à ergols liquides [5]. Les composants généraux d'un système propulsif de ce type peuvent être résumés en :

- Une ou plusieurs chambres de poussée ;
- Un ou plusieurs réservoirs ;
- Un système d'alimentation qui fournit le débit liquide dans la chambre de combustion ;
- Une source de puissance qui permet le fonctionnement du système d'alimentation ;
- Des canalisations pour les fluides ;
- Des dispositifs de régulation pour amorcer et régler le débit des ergols (les vannes par exemple) ;
- Des systèmes de refroidissement de la chambre de combustion (par fluides réfrigérant, matériaux ablatifs, etc.) ;
- Une tuyère de sortie des gaz de combustion.

Comme exemple typique d'un tel système, on peut considérer la figure 1.1, qui montre les détails d'un moteur cryotechnique.

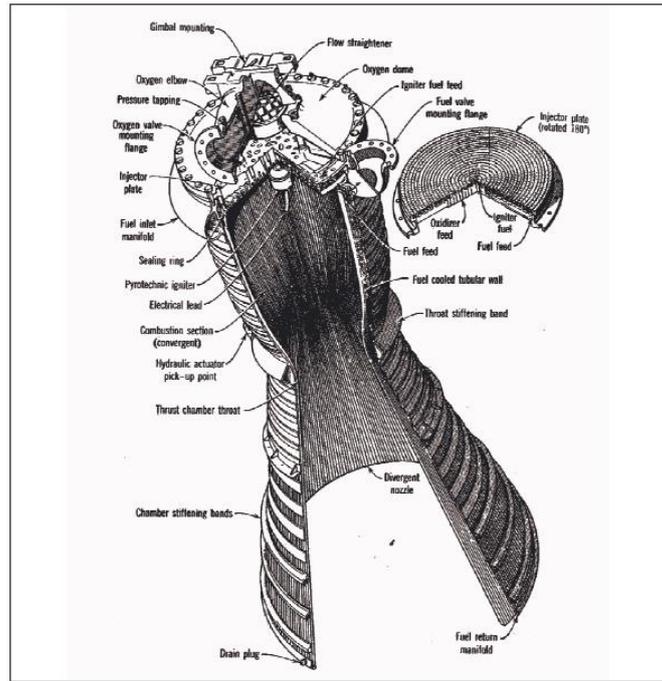


Figure 1.1 Moteur cryotechnique [6].

### 1.3.2. Les ergols

Les propergols liquides ou bien les ergols sont des substances sujettes à des changements de phase et thermochimiques qui déterminent les performances du moteur. Ils peuvent être oxydants, combustibles ou mélanges des deux. Les ergols sont classifiés selon leur composition en :

- Monergols : il s'agit d'un seul fluide qui libère de l'énergie sans avoir besoin d'un deuxième composant. Cette substance est stable en condition atmosphérique mais elle se décompose chimiquement et produit des gaz chauds si elle est réchauffée ou catalysée. L'hydrazine ( $N_2H_4$ ), la monométylhydrazine (MMH), la dissymétrique diméthylhydrazine dissymétrique (UDMH), le peroxyde d'hydrogène ( $H_2O_2$ ), sont des exemples de mono-ergol ;
- Bi-ergol : l'oxydant et le réducteur sont tenus séparés jusqu'à la chambre de combustion. Ce sont les réactifs les plus utilisés dans la propulsion spatiale, comme exemple, on peut citer l'oxygène et l'hydrogène ( $O_2 - H_2$  utilisés dans l'étage principale et l'étage supérieur du lanceur européen Ariane 5 ECA), l'oxygène et le RP1 ( $O_2 - RP1$ , ce dernier est un combustible très utilisé dans la propulsion fusée, il est à base d'hydrocarbures :  $CH_{1,97}$ ), le peroxyde d'azote avec l'hydrazine ( $N_2O_4 - N_2H_4$ ) ou ses dérivés méthylés (UDMH, MMH), le fluor et l'hydrogène ( $F_2 - H_2$  : très performant mais très peu utilisé à cause de sa forte réactivité chimique avec les métaux et les polymères ainsi que sa toxicité et son coût élevé);
- Tri-ergol : le couple d'oxydant et combustible est combiné à un troisième ergol réducteur ; les deux combustibles sont généralement utilisés l'un après l'autre et non de façon

simultanée, par exemple RP1 – H<sub>2</sub> – O<sub>2</sub> hypergolique (spontanément allumable), où avec de l'hydrogène en excès.

La classification des ergols peut être faite aussi selon la possibilité de conservation pour des longues périodes, comme décrit dans le paragraphe 1.3, ils sont distingués en cryogéniques et stockables.

### 1.3.3. Le système d'alimentation

Dans la propulsion spatiale, deux principaux systèmes d'alimentation sont utilisés : celui à turbopompe, basé sur un système de pompes [5] pour permettre aux ergols de quitter les réservoirs à faible pression et aller dans la chambre de combustion à haute pression, et celui à pressurisation [6], qui utilise un gaz à haute pression pour faire sortir les ergols des réservoirs. Tout système d'alimentation est constitué de tuyauterie, d'une série de vannes, de dispositifs pour le remplissage et la purge des ergols, ainsi que des dispositifs de contrôle pour commencer, arrêter et régler son fonctionnement.

Les systèmes d'alimentation à réservoirs pressurisés (figure 1.2) offrent des performances supérieures si la pression de chambre, le débit des ergols et la poussée sont bas. Ils sont utilisés quand on a besoin d'impulsions répétitives de poussée de courte durée. Le désavantage de cette configuration est une augmentation de masse due à un troisième réservoir (celui du gaz qui met en pression la ligne d'alimentation) et au fait qu'à cause des pressions élevées, les parois des réservoirs doivent être plus épaisses.

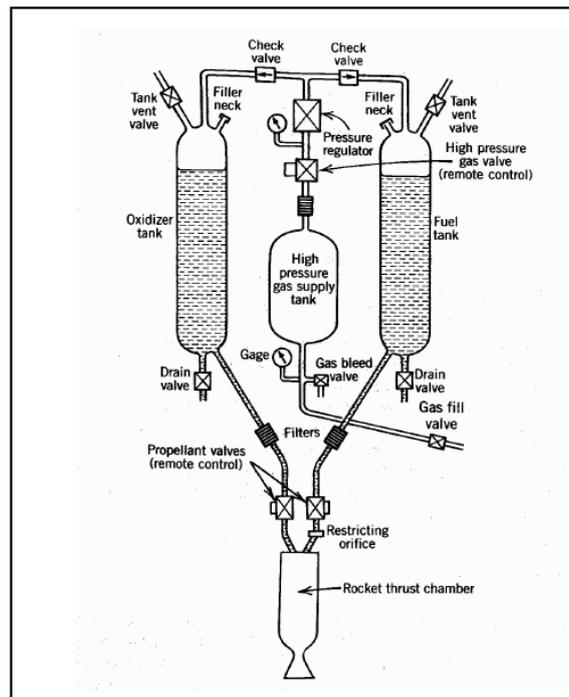


Figure 1.2 Système d'alimentation à réservoirs pressurisés [7]

Par contre, les systèmes à turbopompe (figure 1.3), fonctionnent sous des pressions basses dans les réservoirs (même dix fois moins) et offrent des avantages en terme de légèreté. Les pompes sont

actionnées par des turbines qui sont mises en mouvement par les gaz chaud d'un générateur de gaz, qui utilisent des petites quantités d'oxydant et de combustible provenant des canalisations principales. Les performances sont supérieures si des pressions de chambre et des poussées élevées sont prévues. Ils sont utilisés quand les poussées élevées sont de longue durée, comme c'est le cas pour la propulsion des deux premiers étages d'Ariane 5 ECA et du SSME (Space Shuttle Main Engine) de la navette Américaine [7].

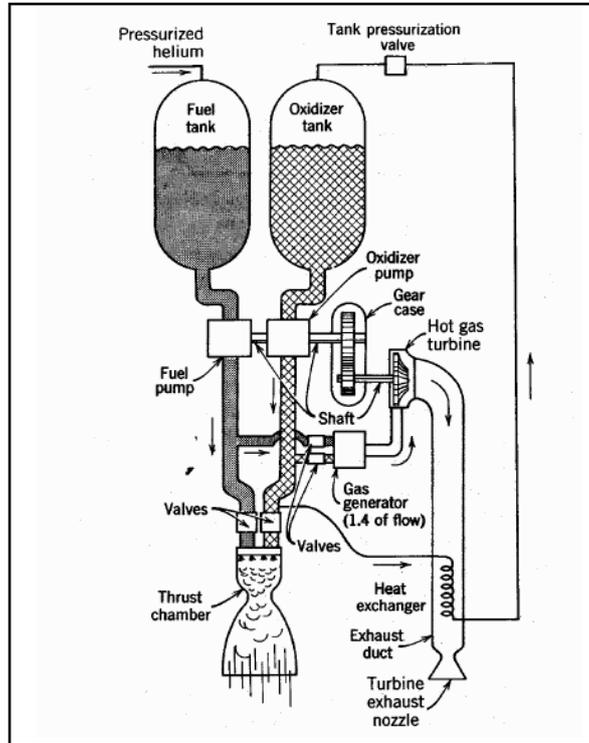


Figure 1.3 Système d'alimentation à turbopompe [7]

### 1.3.4. Le système d'injection

La fonction du système d'injection est d'introduire dans la chambre de combustion la correcte quantité de combustible et d'oxydant afin de permettre la vaporisation et le mélange complet des réactifs et régler le rapport de mélange ( $R_m$ ) à la valeur de projet.

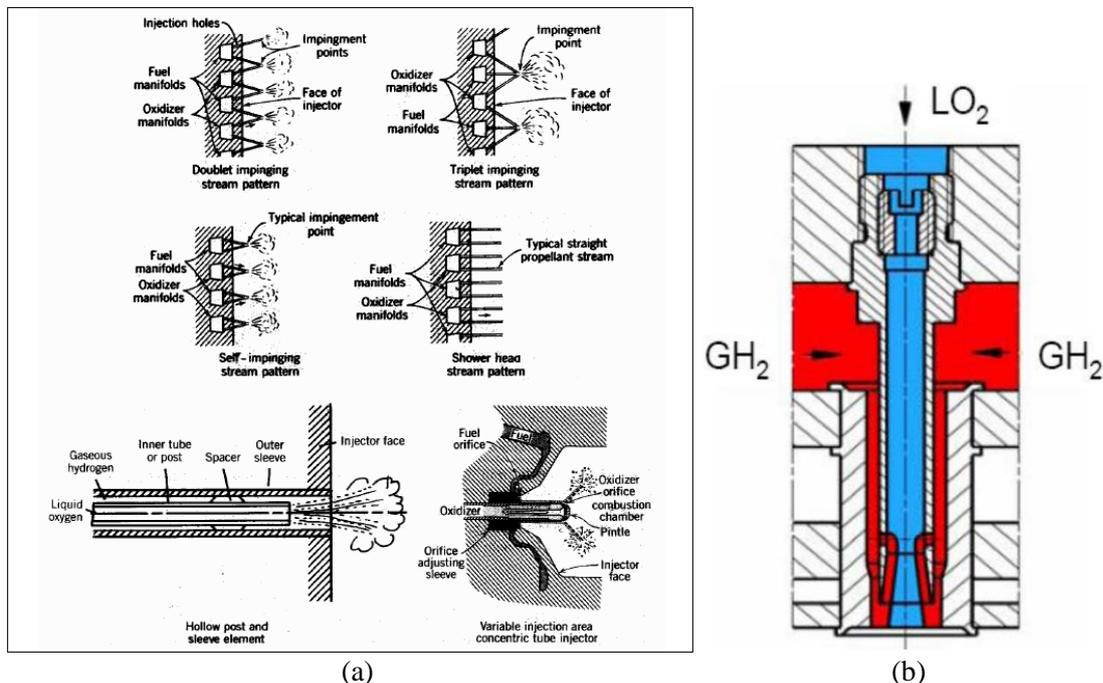
Les paramètres à dimensionner dans le projet d'un système d'injection sont : les points d'injection et leurs distribution sur la face d'injection ; la forme géométrique et la dimension des éléments d'injection, ainsi que leurs caractéristiques hydrauliques ; l'angle de croisement des jets des réactifs ainsi que la distance à laquelle ils vont se rencontrer (pour avoir un bon mélange dans la chambre de combustion) ; la vitesse des fluides à l'injection et la chute de pression nécessaire à travers l'injection qui permet une telle vitesse. Ces paramètres sont généralement déterminés expérimentalement, en prenant soin d'utiliser les bons réactifs, car les systèmes d'injection sont dessinés pour une combinaison particulière de combustible/oxydant (on peut toutefois utiliser des fluides de similitude et vérifier avec les ergols réels). Considérant la géométrie d'un système d'alimentation, on peut distinguer trois typologies de construction (figure 1.4) :

- à jets croisés (impinging jets) : les points d'injection sont disposés de façon à permettre aux ergols de s'impacter (soit combustible/combustible, oxydant/oxydant, on parle alors de like-on-like, soit combustible/oxydant, on parle alors d'injecteurs like/unlike) et de favoriser leur atomisation et mélange. L'impact peut être fait sur deux ou trois jets, selon les rapports des débits. Cette configuration est souvent utilisée pour les moteurs à ergols stockables comme le Viking d'Ariane 1 – 4.
- à jet parallèles (shower head) : le mélange d'ergols (très réactifs) est obtenu par la turbulence et la diffusion radiale dans la chambre de combustion. Cette typologie à non-impact était utilisée dans le moteur allemand V2 des années 44-45 (voir [8] et [9]).
- à jets coaxiaux : dans cette configuration utilisée fréquemment dans la propulsion cryotechnique pour les ergols LOx/GH<sub>2</sub> (dans le moteurs Vulcain et Vulcain 2 par exemple), les éléments d'injection sont cylindriques et à flux concentriques. Le jet liquide central est injecté à une vitesse voisine de 20 m/s et l'écoulement annulaire de combustible à une vitesse de 300 m/s environ : cette différence de vitesse assure la pulvérisation du jet central.

Si les ergols ne sont pas assez volatils et/ou réactifs, le processus d'injection est rendu plus énergétique par :

- l'utilisation de surfaces d'impact,
- la formation de vortex à côté de la surface d'injection,
- et des autres dispositifs favorisant l'atomisation (le swirl par exemple).

Ces techniques sont aujourd'hui peu utilisées car il est préférable d'éviter des complications technologiques non indispensables.



1.3.5. La chambre de combustion

*La géométrie*

La chambre de combustion est la partie du moteur où prend place la combustion des réactants pour produire des gaz brûlés, qui seront éjectés par la tuyère, afin d’obtenir une poussée élevée. Les paramètres qui la caractérisent sont sa forme géométrique et son volume, choisis pour minimiser sa masse et ses inerties. Son volume doit être assez grand pour garantir le bon mélange des réactants et une complète combustion : une pression élevée peut permettre une réduction de son volume car cela améliore le mélange des réactants et surtout la vaporisation, mais quand le volume de la chambre est trop petit, la combustion peut être incomplète. En phase de fonctionnement normal, elle supporte des pressions et des températures élevées (pour le Vulcain la pression de la chambre est environ 100 bars et la température est supérieure à 3500 K), ce qui permet d’obtenir des performances élevées en termes de poussée.

*La combustion*

Les chambres de combustion des fusées à ergols liquides sont le siège d’un nombre considérable de phénomènes physiques encore mal investis par la communauté scientifique [7]. Comme ils sont fortement dépendants du type d’injecteur choisi et des ergols utilisés, il conviendra de choisir une configuration spécifique pour faire une étude phénoménologique précise. En considérant un moteur alimenté par l’oxygène liquide et l’hydrogène gazeux injectés par des injecteurs coaxiaux, on peut représenter les processus qui prennent place dans la chambre de combustion, de l’injection dans la chambre à l’expansion en la tuyère, par le schéma montré en figure 1.5 :

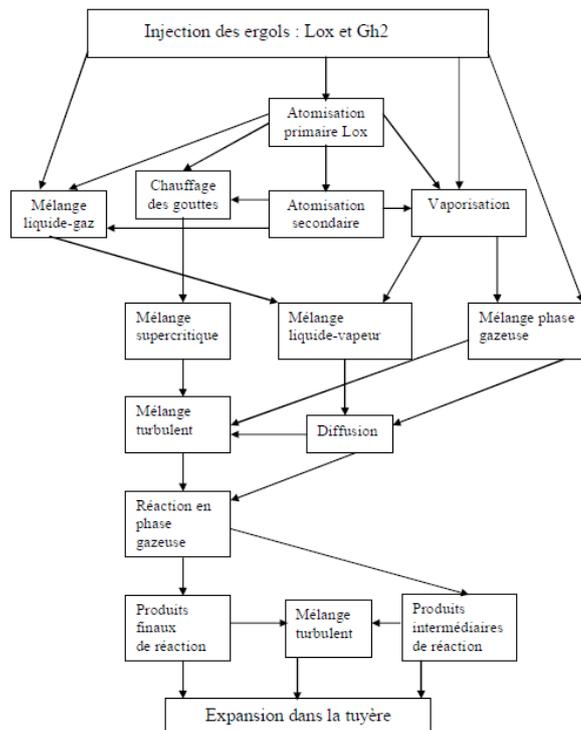


Figure 1.5 Schématisation de la combustion dans un foyer LOx/GH<sub>2</sub> [7]

Comme on peut voir par ce schéma, les liens entre les différents phénomènes présents pendant la combustion sont plutôt complexes. Par exemple, si l'on considère la vaporisation, on ne peut pas lui donner de vraie position chronologique, car on a un front de vaporisation qui implique de l'oxygène à la sortie de l'injecteur, ainsi que des gouttes et des fragments de liquide qui sortent de l'atomisation primaire, et des gouttes plus petites qui se forment par l'atomisation secondaire. Comme l'ont montré W.A. Sirignano *et al.* [11], une vision approximative et primitive, mais efficace pour une analyse des phénomènes, est de concevoir la combustion dans un moteur fusée comme une séquence de processus suivie par un élément de propergol. Les processus sont dans l'ordre : l'injection, l'atomisation primaire, l'atomisation secondaire, le chauffage du liquide, la vaporisation, le mélange et le chauffage de la phase gazeuse, les réactions chimiques de la phase gazeuse et la diffusion d'une partie de chaleur vers les ergols frais. Ainsi, ils mettent en évidence que :

- La combustion est continue : les éléments de propergols injectés à différents moments ne sont pas forcément au même processus à un instant donné ;
- La combustion présente une distribution spatiale : les éléments distincts injectés au même instant de temps, peuvent être en différents processus à un moment donné.

Les détails d'un processus pour un élément spécifique dépendant des processus précédents qu'il a subit et des processus subits par les autres éléments. Par exemple, la vitesse de vaporisation pour un élément dépend soit de son processus d'atomisation, qui détermine sa taille, soit de la chaleur transférée par les autres éléments déjà brûlés. Tout processus à une durée, ou un temps caractéristique, associés, et si un temps dans la séquence des processus est beaucoup plus long que la somme des autres, le temps de combustion de l'élément de propergol est essentiellement donné par ce temps caractéristique. On estime que ce processus est le contrôleur de vitesse, car la vitesse de combustion est approximativement égale à celle de ce processus. On observe qu'une variation de pression, de température, ou de vitesse dans la chambre de combustion, influencera ces processus, en particulier les temps caractéristiques et les vitesses associées : dans ce cas, des phénomènes dynamiques et dépendants des fréquences sont attendus (instabilités acoustiques).

#### *Refroidissement des chambres de combustion*

Tous les éléments constitutifs du moteur sont soumis à de très fortes contraintes thermiques. Plus particulièrement, les canaux de refroidissement sont en charge du maintien en dessous d'une température admissible les parois de la chambre de combustion.

Pour mieux saisir les tenants et aboutissants de la difficulté que représente la conception du système de refroidissement, il est nécessaire de s'attarder sur le mode de fonctionnement du moteur qui a été conçu autour du cycle schématisé sur la figure 1.6(b). Pour des raisons pratiques, l'hydrogène et l'oxygène cryogéniques sont stockés dans les réservoirs à des pressions de quelques bars (3,5 bars pour l'oxygène et 2,15 bars pour l'hydrogène) mais à très faibles températures. Afin d'améliorer l'efficacité de la propulsion, les deux fluides sont pressurisés après leur passage dans des turbopompes à des pressions avoisinant les 100 bars. La combustion du mélange  $H_2/O_2$  conduit à une

température à l'intérieur de la chambre autour de 3500 K bien loin de la température admissible par le NARLoy-Z, alliage de cuivre à forte conductivité thermique ( $\lambda \approx 350 \text{ W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$ ) qui ne peut supporter que des températures limites de l'ordre de 800 K avant détérioration. Les flux thermiques résultants sont donc très intenses et ceux-ci peuvent atteindre  $80 \text{ MW/m}^2$ , voire plus au col de la tuyère [12].

L'alimentation de la chambre de combustion en réactif est assurée par deux turbopompes entraînées par des gaz produits par la combustion d'une faible partie des réactifs (environ 3%) dans une chambre annexe. Le circuit d'hydrogène se dirige vers un circuit de refroidissement intégré aux parois de la chambre de combustion. L'hydrogène sous haute pression et basse température se réchauffe alors en remontant vers la chambre de combustion.

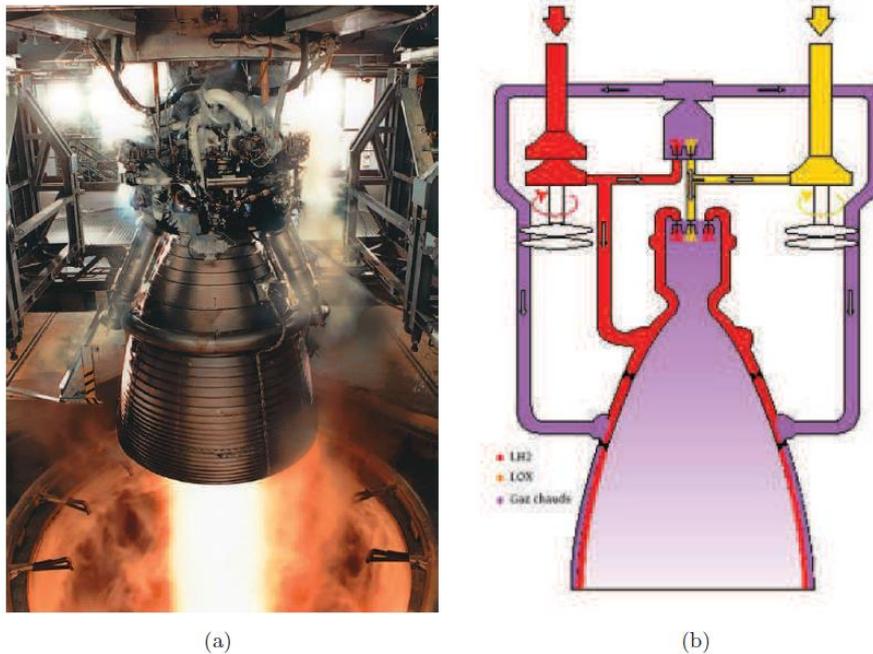


Figure 1.6 (a) Moteur cryotechnique Vulcain 2 et un schéma de son principe de fonctionnement (b) [12]

L'objectif est double, le premier est de récupérer une partie de l'énergie de la combustion perdue par transfert thermique à la paroi et de la réinjecter dans la chambre de combustion améliorant ainsi le rendement de la combustion ; le second est d'assurer l'intégrité mécanique des parois de la chambre et d'une partie du divergent en le refroidissant. La mauvaise évaluation des transferts thermiques dans ces canaux de refroidissement impacte donc au niveau de la propulsion, mais surtout, peut aussi conduire à la perte du lanceur. La déformation des canaux de refroidissement se traduit par des fissurations de la paroi de la chambre de combustion où de l'hydrogène est réinjecté. Cette alimentation secondaire a lieu après la zone de combustion principale et ainsi modifie la répartition thermique sur le divergent. La structure mécanique du divergent ne pourrait pas endurer ce traitement et commencerait à se déformer, désaxant ainsi la poussée du moteur (naissance de charges latérales) et rendant impossible le contrôle du lanceur.

Le refroidissement des parois de la chambre de combustion est un point critique du moteur. La connaissance fine et la prédiction des flux thermiques représentent des enjeux industriels importants. Ce constat est d'autant plus présent que la prochaine génération de moteur utilisera des cycles où ces transferts thermiques joueront un rôle encore plus prépondérant.

### 1.3.6. Fonctionnement des moteurs fusées cryotechniques

On décrit ci-dessous le fonctionnement et la phénoménologie des moteurs fusées à ergols liquides cryogéniques, qui constituent le contexte de cette partie. Nous savons bien que toutes les versions d'Ariane ont utilisé et utilisent des moteurs cryotechniques. La version actuelle Ariane 5 ECA embarque deux moteurs de ce type, le moteur Vulcain 2 et le moteur HM-7B (figure 1.7), ce dernier étant voué à être remplacé par le nouveau moteur cryotechnique Vinci. D'un point de vue technologique, ces moteurs fonctionnent tous globalement de la manière suivante. Les ergols sont stockés sous forme liquide à très basse température dans des réservoirs pressurisés, et sont injectés dans la chambre de combustion grâce à de puissantes turbopompes. L'injection de l'oxygène et de l'hydrogène dans la chambre se fait à travers un injecteur frontal constitué d'un nombre important d'injecteurs coaxiaux indépendants. Par ailleurs, du fait de la température élevée de la combustion dans la chambre, l'hydrogène liquide circule autour de la paroi avant son injection de manière à refroidir la chambre. Par conséquent, l'hydrogène se retrouve sous forme gazeuse au moment de son injection dans la chambre. Les caractéristiques respectives des moteurs HM-7B, Vinci et Vulcain 2 sont détaillées dans le tableau 1.1.

Si ces moteurs sont construits sur le même modèle, leurs conditions de fonctionnement, en revanche, varient. Les phénomènes physiques qui en résultent sont alors complètement différents. Le paramètre important est la pression de chambre, à comparer aux pressions critiques de l'hydrogène et de l'oxygène. La pression et la température critiques de l'hydrogène sont en effet d'environ 13 bars et 33 K, tandis que celles de l'oxygène avoisinent les 50 bars et 154 K. Par conséquent, la pression nominale dans HM-7B s'établissant à 37 bars, l'hydrogène est dans son état supercritique mais l'oxygène reste sous forme liquide (subcritique). Dans ces conditions, la physique en sortie des injecteurs coaxiaux est celle de l'atomisation d'un jet liquide par un écoulement gazeux. En revanche, dans le cas du moteur Vulcain 2, la pression nominale de la chambre de combustion s'établit à 115 bars. Les deux ergols brûlent alors dans leur état supercritique. La physique du phénomène est complètement différente : l'interface liquide-gaz disparaît et les propriétés thermodynamiques de l'oxygène sont fortement variables [13]. Ces deux modes de fonctionnement doivent être appréhendés de manière différente, et en l'occurrence nous ne nous intéresserons dans cette étude qu'au cas de la combustion cryotechnique en régime supercritique. Cela peut concerner donc le moteur HM-7B, mais également le moteur Vulcain 2.



Figure 1.7 Moteurs cryotechniques HM-7B et Vulcain 2 [13]

Tableau 1.1 – Caractéristiques techniques des moteurs cryotechniques HM-7B, Vulcain 2 et Vinci.  
[13-15]

	HM 7B	Vinci	Vulcain 2
Poussée dans le vide (kN)	65	180	1340
Impulsion spécifique dans le vide (s)	446	465	434
Pression de combustion (bars)	37	60,8	115
Hauteur (m)	2,01	4,2	3,45
Masse totale (kg)	165	550	2100
Diamètre sortie de tuyère (m)	0,99	2,15	2,10
Rapport d'expansion de la tuyère	83	240	58
Débit d'ergols (H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub> ) (kg/s)	2,5 - 12,3	5,8 - 33,7	45 - 275
Rapport de mélange	4,9	5,8	6,1
Vitesse de rotation maximale des turbo-pompes (H <sub>2</sub> - O <sub>2</sub> ) (tr/min)	60000 - 13000	90000 - 18000	39800 - 13700
Vitesse d'éjection dans le vide (km/s)	4,4	4,56	4,2
Nombre d'injecteurs coaxiaux	90	122	516

#### 1.4. Conclusion

La propulsion liquide demeure jusqu'à nos jours le moyen le plus efficace et le plus fiable dans le marché de la propulsion spatiale. Malgré les difficultés technologiques inhérentes aux systèmes d'alimentation à turbopompes et aux moyens de stockage sous forme liquide, le couple LO<sub>x</sub>/GH<sub>2</sub> est toujours considéré comme un vecteur énergétique potentiel. En configuration d'injection coaxiale, ce couple offre de bonnes stabilités aux sollicitations hautes et basses fréquences de l'acoustique de la chambre de combustion et des systèmes hydrauliques. Les systèmes de refroidissement utilisés dans

les moteurs à ergols liquides sont essentiellement basés sur la technique régénérative par circulation de l'hydrogène liquide autour des parois du divergent de tuyère.

Une tête d'injection de type LOx/GH<sub>2</sub> en configuration coaxiale, dispose d'une multitude de trous (une centaine dans le cas Vulcain) qui permettent de d'alimenter la chambre de combustion en débit important d'oxygène liquide et d'hydrogène gazeux. Le jet résultant est du coup, diphasique et c'est le cisaillement entre la phase liquide et son entourage qui permet une formation d'un spray plus au moins dense.

L'analyse de l'écoulement diphasique doit faire appel aux notions de cassure du dard liquide, de formation des gouttes, d'atomisation et de vaporisation. Ces phénomènes seront explicités dans le chapitre qui va suivre.

## **Chapitre 02**

# **Thermodynamique des ergols et analyse bibliographique**

## 2. Chapitre 02 : Thermodynamique des ergols et analyse bibliographique

### 2.1. Introduction

Après avoir présenté au chapitre 1 une partie technologique dédiée au moteur fusée à ergols liquide, ce chapitre vise à présenter en première lieu, les notions de la thermodynamique des ergols cryogéniques dans un régime trans- et supercritique et en deuxième lieu, une synthèse bibliographique des différentes investigations et approches utilisées pour les simulations numériques des écoulements monophasiques (monergols) et diphasiques (diergols). Les phénomènes d'atomisation, désintégration, dynamique et structure des flammes seront analysés. L'objectif est de situer spécifiquement le contexte et les origines de la stratégie que nous adopterons dans les chapitres trois et quatre de cette thèse.

### 2.2. La thermodynamique des ergols

De nombreuses campagnes expérimentales ont permis d'étudier l'état et le comportement de différents corps purs en fonction de la température et de la pression. Ces campagnes ont concerné les trois phases, solide, liquide et gazeuse de la matière. La phase gazeuse est caractérisée par une faible masse volumique et des particules qui interagissent très peu entre elles, alors que la phase liquide possède une masse volumique élevée qui conduit à de fortes interactions entre particules. Ces interactions sont couramment modélisées par un potentiel d'interaction de Lennard-Jones qui comprend un terme répulsif à courte portée et une partie attractive à longue portée.

Il est commun de représenter dans un diagramme volume/température/pression, l'état d'un corps pur comme schématisé sur la figure 2.1. De manière générale, pour un couple  $(T; P)$  la matière n'est stable que dans un seul de ces trois états. A la frontière entre ces domaines, il existe des courbes où l'équilibre entre deux phases est possible, en plus d'un point triple où les trois phases coexistent.

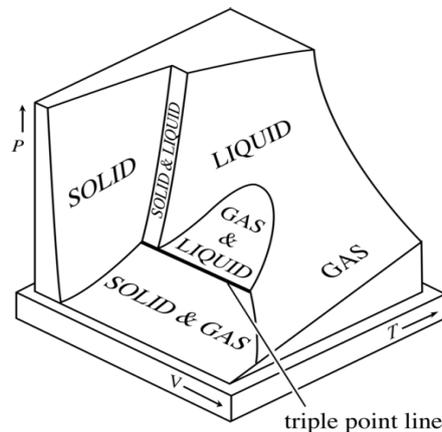


Figure 2.1 : Représentation dans l'espace ( $V, T$  et  $P$ ) du diagramme de stabilité d'un corps pur [16]

Si l'on considère une substance gazeuse pure, il est bien connu qu'il existe une température en-dessous de laquelle, si la masse volumique est suffisante, la condensation vers l'état liquide aura lieu. Il est donc raisonnable de penser qu'il existe une température au-dessus de laquelle la condensation ne peut plus avoir lieu : c'est la température critique. De la même manière, il est possible de définir une pression critique.

La figure 2.2 nous donne une représentation d'un diagramme de phase d'une substance pure. Notons que l'axe de la pression est non linéaire et que la phase solide à haute température intervient à très haute pression. Nous constatons l'existence de zones à phase unique, tandis que les lignes représentent la coexistence de deux phases. Si nous nous déplaçons le long de la courbe de coexistence gaz-liquide, la pression et la température augmentent. Le liquide devient moins dense à cause de l'expansion thermique et le gaz devient plus dense de par la pression qui croît. Il arrive un point où les masses volumiques des deux phases deviennent identiques. La distinction entre liquide et gaz disparaît et la courbe se termine : c'est le point critique.

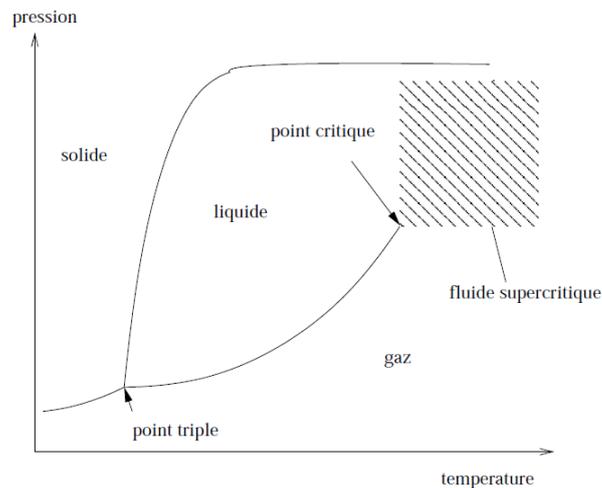


Figure 2.2 : Diagramme de phase d'un corps pur [17]

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. Par la même, la température critique est la température au-dessus de laquelle il ne peut y avoir ce même type de changement de phase quelque soit l'évolution de la pression. Lorsque la pression est supérieure à la pression critique d'un fluide, mais que sa température est inférieure à sa température critique, on parle de "fluide compressé". Les fluides compressés et supercritiques présentent de forts écarts de comportement face à celui d'un gaz parfait et possèdent des propriétés thermodynamiques et de transports intermédiaires entre celles d'un liquide et d'un gaz.

### 2.2.1. Ecart au comportement d'un gaz parfait

Le gaz parfait est le modèle de fluide le plus simple qui puisse être envisagé. Il possède deux définitions complémentaires, suivant que l'on considère une description macroscopique ou microscopique. C'est également un modèle de référence dont les propriétés sont aisément calculables.

- Au niveau macroscopique, un gaz parfait est un fluide pour lequel la température ( $T$ ), la pression ( $P$ ), et le volume molaire ( $v$ ), sont reliés par la relation suivante :

$$P v = R T \quad (2.1)$$

où  $R$  est la constante des gaz parfaits ( $= 8.314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1}$ ). Cette équation regroupe en fait les lois historiques énoncées par Boyle et Mariotte (invariance du produit de la pression et du

volume à température constante), Gay-Lussac (proportionnalité entre pression et température à volume constant) et Charles (proportionnalité entre volume et température à pression constante).

- Au niveau microscopique, un gaz parfait est un fluide dont les particules constitutives sont assimilables à des points matériels sans interaction. Dans un tel fluide, il est supposé que les molécules n'ont pas de volume propre et possèdent seulement une énergie cinétique du fait de leur vitesse de déplacement. Ce modèle postule également qu'aucune force cohésive de nature physico-chimique (par exemple les forces de Van der Waals) n'existe entre les molécules du gaz. Le modèle du gaz parfait s'applique donc essentiellement aux gaz sous faible pression, condition sous laquelle les interactions entre molécules sont suffisamment faibles pour être négligées.

La différence de comportement des fluides supercritiques, ou encore dit de gaz réels, face à celui des gaz parfaits est principalement due au fait que le régime supercritique est "localisé" à haute pression. Dans ces conditions, le libre parcours moyen des molécules du fluide est grandement réduit et les interactions intermoléculaires ne peuvent plus être négligées. Ceci explique le fait que nous ne considérons pas les états où seule la température a une valeur supercritique comme des états supercritiques. L'écart au comportement d'un gaz parfait est habituellement quantifié par le facteur de compressibilité,  $Z$ , défini de la manière suivante :

$$Z = Pv/RT \quad (2.2)$$

Il est évident que pour un gaz parfait, ce facteur de compressibilité est toujours égal à 1.

La figure 2.3 présente l'évolution du facteur de compressibilité d'une substance pure, en fonction de la "pression réduite" ( $P_r$ ) et de la "température réduite" ( $T_r$ ). Par exemple, pour la température et la pression on a respectivement :  $P_r = P/P_c$  et  $T_r = T/T_c$ . On peut voir sur ce graphe, que le facteur de compressibilité présente de fortes variations à l'approche du point critique ( $P_r = 1$  et  $T_r = 1$ ) ce qui signifie que son comportement y est fortement différent de celui d'un gaz parfait. En revanche, on constate qu'à faible pression et/ou à haute température, la valeur de ce facteur est proche de 1. Ceci est normal, puisque dans ces conditions, les hypothèses et approximations du modèle de gaz parfait redeviennent valides : à basse pression, le fluide est peu dense (c-à-d que les molécules sont diffuses) et les molécules n'interagissent que peu entre elles ; à hautes températures, les molécules se déplacent très vite et les interactions intermoléculaires deviennent négligeables face aux interactions de type collisionnelles.

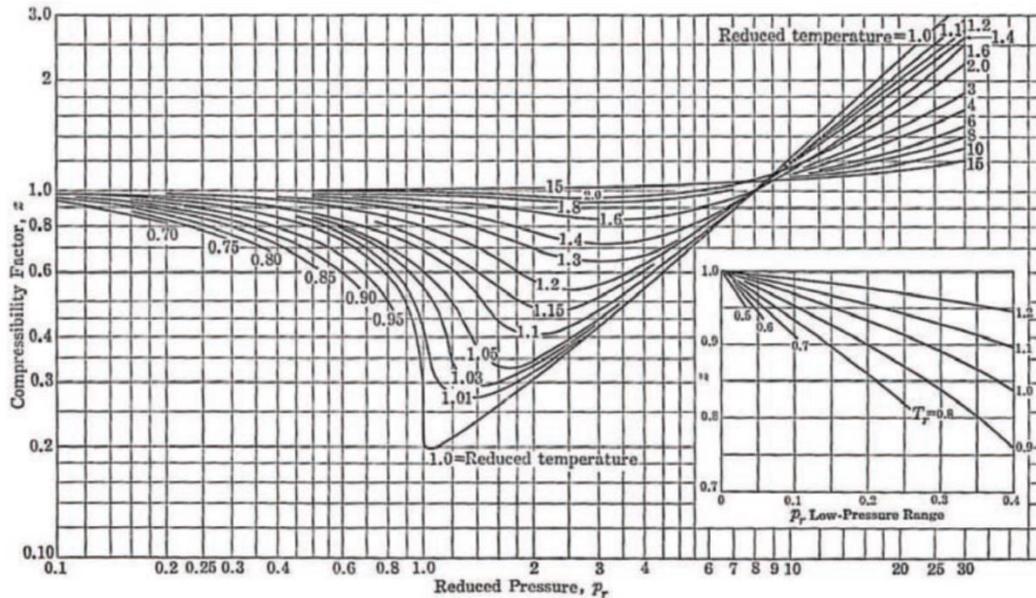


Figure 2.3 : Facteur de compressibilité d'une substance pure en fonction de la pression réduite et de la température réduite [18].

### 2.2.2. Modifications des propriétés d'une substance pure près du point critique

A l'approche du point critique, les propriétés thermodynamiques et de transport d'une substance pure subissent des modifications importantes. Ceci est illustré sur les figures 2.5 pour l'oxygène et 2.6 pour l'oxygène et l'hydrogène.

- *La masse volumique*

Sur la figure 2.5, une variation brutale de la masse volumique est observable lorsque que l'on se place sur une isobare proche de la valeur critique de l'oxygène, 5,04 MPa. Cette importante modification intervient lorsque la température passe d'une valeur sous-critique à une valeur supercritique. En-dessous des valeurs critiques de la température et de la pression, il y a changement de phase et coexistence des deux phases. Pour des valeurs de pressions supercritiques, il n'y a plus de phases distinctes et la variation de la masse volumique au passage de la température critique est d'autant moins importante que la pression réduite est grande. Ce changement de masse volumique intervient, pour des pressions supérieures à la pression critique, sur ce que l'on appelle la "ligne de pseudo-ébullition" (figure 2.4). Cette ligne est en fait le prolongement de la ligne de changement de phase liquide-gaz au-dessus du point critique. Cette variation de la masse volumique est très forte, et pourra donc être problématique d'un point de vue calcul, lorsque la pression réduite sera proche de l'unité.

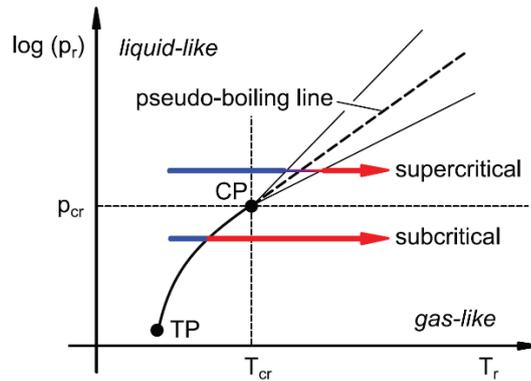


Figure 2.4 : Ligne de pseudo-ébullition [19]

- *Capacité calorifique à pression constante ( $C_p$ )* : La capacité calorifique à pression constante présente de forte variation à l'approche du point critique. Théoriquement, la valeur de celle-ci tend vers l'infini au point critique. Ici, les fortes variations de  $C_p$  se font à la traversée de la de pseudo-ébullition. Ce phénomène est nettement observable sur la figure 2.5, où un changement rapide de comportement intervient autour du point critique.
- *Propriétés de transport* : Les coefficients de transport tels que la viscosité et la conductivité thermique subissent également de fortes variations à l'approche du point critique (figure 2.5). La viscosité d'un gaz augmente avec la température, tandis que celle d'un liquide diminue avec la température. Ce phénomène est évidemment observé en-dessous des conditions critiques. Une fois les pressions et températures critiques dépassées, la viscosité du fluide suit 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 plus que dans la zone supercritique où les températures sont de l'ordre de 103).

La diffusion d'espèces (figure 2.6) est grandement liée à l'état de masse volumique du système. Le coefficient de diffusion d'espèces en phase liquide est très faible par rapport à celui en phase gazeuse. Lors du passage par le point critique, la diffusion augmente brusquement. Il est difficile de calculer analytiquement les valeurs des coefficients de transport. Certaines formes empiriques seront présentées en chapitre 3.

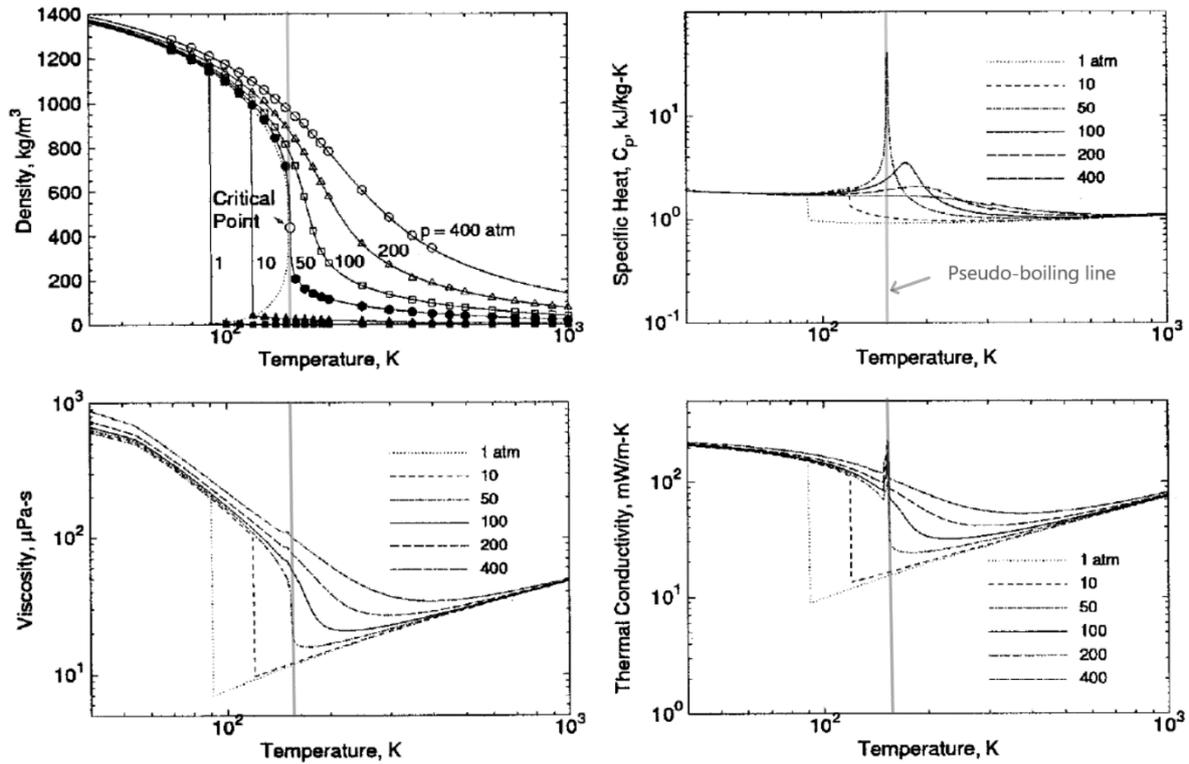


Figure 2.5 : Masse volumique, capacité calorifique, viscosité et conductivité thermique (de l'oxygène pur) pour des températures entre 40 K et 1000 K et des pressions de 1, 10, 50, 100, 200, 400 atm [20].

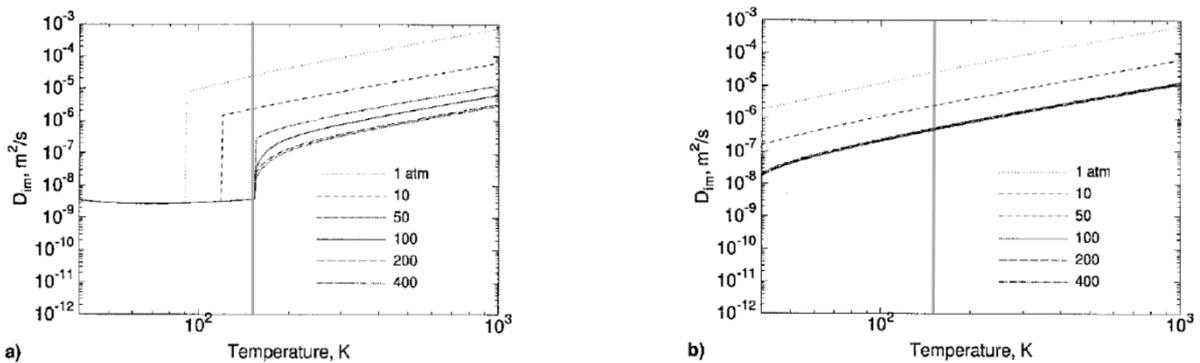


Figure 2.6 : Diffusion d'espèce de l'oxygène pur (a) et de l'hydrogène pur (b) pour des températures entre 40 K et 1000 K et des pressions de 1, 10, 50, 100, 200, 400 atm [20].

Il est aussi intéressant de noter que plus les hydrocarbures  $C_nH_{2n+2}$  sont lourds ( $n$  augmente), plus leur pression critique décroît et plus leur température critique augmente (figure 2.7).

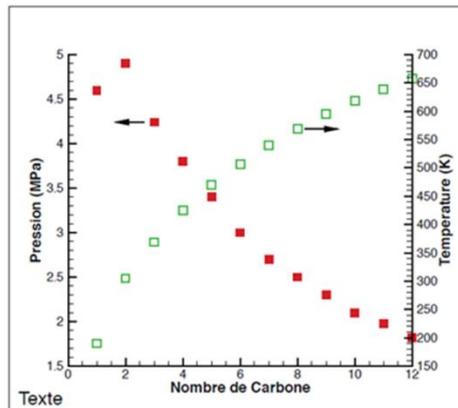


Figure 2.7 : Evolution des pressions et température critiques en fonction du nombre de carbones dans  $C_nH_{2n+2}$  [21].

### 2.2.3. Loi des états correspondants et facteur acentrique

L'utilisation d'une équation d'état (EoS) adaptée permet de lier correctement les variables qui sont la pression, la température et la masse volumique. Nous avons déjà vu que le modèle du gaz parfait ne permet pas de réaliser cela dans les conditions supercritiques (c.f. section 2.2.1). En effet, avec un modèle gaz parfait, la compressibilité est toujours égale à 1, ce qui va conduire à des erreurs importantes lorsque les conditions sont telles que le facteur de compressibilité est fortement différent de cette valeur. Par exemple, la valeur expérimentale de la masse volumique de l'azote sous une pression de 60 bar et une température de 150 K est d'environ de  $226 \text{ kg/m}^3$  alors que l'utilisation du modèle de gaz parfait nous donne une valeur d'environ  $135 \text{ kg/m}^3$  ce qui conduit à une erreur relative de 40% [21].

Une équation d'état peut être écrite sous la forme générique :

$$P_r = P_r(v_r, T_r) \quad (2.3)$$

La loi des états correspondants stipule que la fonction  $P_r(v_r, T_r)$  est une fonction universelle pour toutes les substances. Cette loi, qui n'est bien sûr que partiellement vraie, est basée sur le fait que les diagrammes  $P - v - T$  des substances pures ont tous approximativement la même forme. Ce principe des états correspondants peut être étendu à toutes les propriétés thermodynamiques, si elles sont réduites par les bons paramètres critiques. La figure 2.8 illustre ce principe. On y voit tracé le diagramme  $(P, v)$  pour le méthane et l'azote en coordonnées réduites. On peut constater que les courbes de pression de vapeur saturante et de liquide saturant sont quasiment confondues dans l'espace des variables réduites. Ce principe prédit aussi que le facteur de compressibilité au point critique,  $Z_c$ , est une constante environ égale à 0,29 pour toutes les substances. Le tableau 2.1, qui référence la valeur expérimentale de  $Z_c$  pour quelques substances, montre que c'est quasiment vrai. Néanmoins, cette loi ne permet pas d'obtenir des résultats très précis, surtout dans le cas de molécules non-sphériques. Afin de corriger ce manque de précision, le concept de facteur acentrique ( $\omega$ ) a été introduit par Pitzer [22].

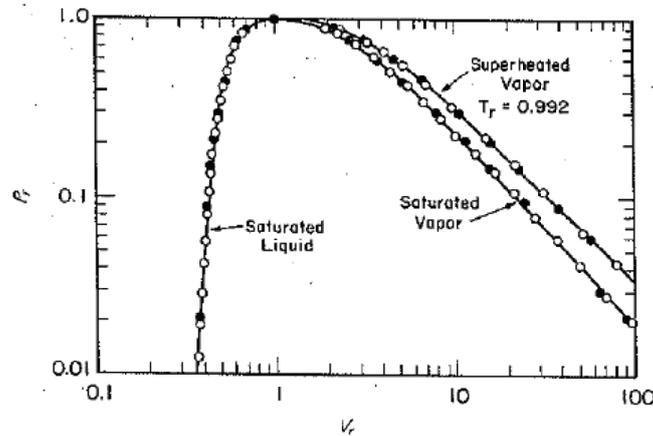


Figure 2.8 : Illustration du principe des états correspondants appliqué au méthane et à l’azote. Cercles creux : méthane. Cercles pleins : azote. [23]

Le facteur acentrique, défini comme :

$$\omega = -\log P_r(T_r = 0.7) - 1 \tag{2.4}$$

permet de quantifier l’écart au comportement d’un fluide composé de molécules sphériques. Lorsque les molécules de la substance possèdent une géométrie sphérique (comme le Xénon par exemple), le facteur acentrique est égal à zéro. Afin de tenir compte de ces écarts (figure 2.9), les équations d’état de la forme de l’équation 2.3 sont modifiées de façon à dépendre du facteur acentrique. Elles s’écrivent alors sous la forme générique suivante :

$$P_r = P_r(v_r, T_r, \omega) \tag{2.5}$$

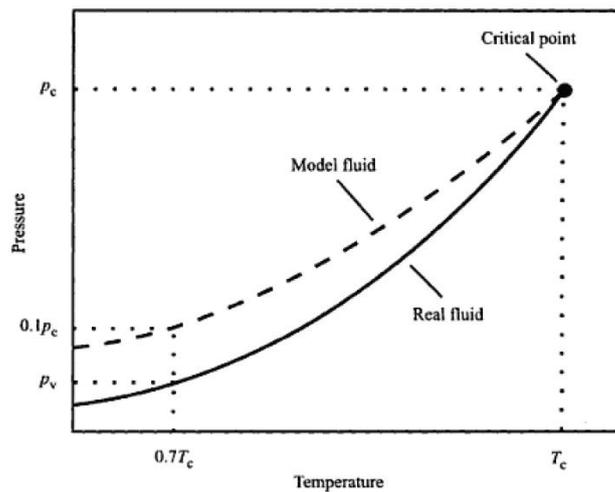


Figure 2.9 : Courbes d’équilibre liquide-vapeur pour un fluide réel et un fluide obéissant à la loi des états correspondants (“Model Fluid”) [24]

A titre d’exemple [23], les pressions et températures critiques de substances pures classiquement utilisées dans la propulsion spatiale sont résumées dans le tableau 2.1.

Tableau 2.1. Coordonnées de points critiques, compressibilité ( $Z_c$ ) et facteur acentrique ( $\omega$ ) [23].

Substance	$P_c$ (MPa)	$T_c$ (K)	$Z_c$	$\omega$
CH <sub>4</sub>	4.6	190.6	0.286	0.011
O <sub>2</sub>	5.04	154.6	0.288	0.022
H <sub>2</sub>	1.3	33.2	0.305	-0.216
N <sub>2</sub>	3.4	126.2	0.289	0.037

#### 2.2.4. Cas d'un mélange d'espèces

Pour un mélange d'espèces, la relation unique reliant les pressions et températures de vapeur saturante ( $T_{sat}$  et  $P_{sat}$ ) n'existe plus. Il y a apparition de nouveaux degrés de liberté : les fractions molaires (ou massiques) des espèces du mélange. Cela signifie que les pressions et températures critiques d'un mélange dépendent de la composition et des fractions molaires de celui-ci. La figure 2.10.a représente le diagramme de phase d'un mélange binaire. Il n'y a plus dans ce cas un seul point critique, mais une ligne de points critiques correspondant à des fractions molaires différentes. Il est important de noter que la température critique d'un mélange n'est pas simplement la moyenne des températures critiques de chaque espèce pondérées par leur fraction molaire (figure 2.10b). La pression critique, quant à elle, est souvent plus élevée que celles des substances pures composant le mélange.

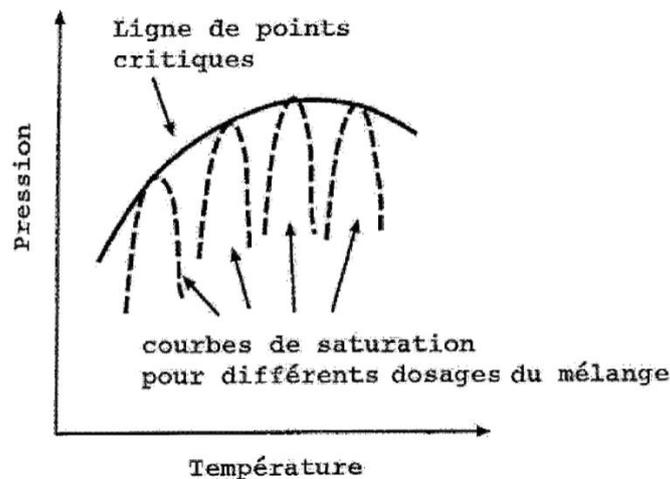


Figure 2.10.a : Locus des points critiques dans le cas d'un mélange binaire [25].

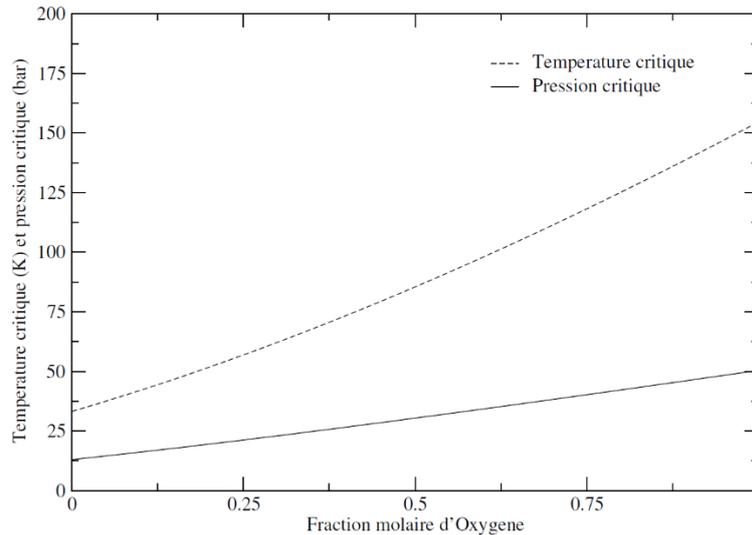


Figure 2.10.b : Evolution de la température critique et de la pression critique du mélange  $H_2/O_2$  en fonction de la fraction molaire d'oxygène (calculé à partir de l'équation de Van Der Walls) [26]

### 2.3. Analyse bibliographique

Au cours des décennies précédentes, beaucoup d'aspects liés aux phénomènes supercritiques [27, 28–30] ont été abordés : “atomisation” et “évaporation” supercritique, mélange supercritique non-réactif, thermodynamique haute-pression, structure, dynamique et stabilisation des flammes supercritiques. Ceci nous amène à faire une investigation bibliographique un peu plus profonde sur les processus fondamentaux liés à ce régime particulier. On va aborder cette phase bibliographique par les aspects expérimentaux de la recherche sur le supercritique, qui ont précédé la modélisation physique et la simulation numérique.

#### 2.3.1. Travaux expérimentaux

##### *Atomisation et mélange*

En 1993, un projet de concertation a été lancé concernant la compréhension des phénomènes d'injection et de combustion dans un environnement critique inhérent aux chambres de combustion de fusées. Le GDR (Groupe de recherche "combustion dans les moteurs-fusées") a initié de nombreuses études expérimentales concernant le jet, l'atomisation, la combustion par pulvérisation et la combustion supercritique dans les moteurs-fusées. Cela constitue un travail de collaboration très important pour comprendre tous les phénomènes en jeu dans les chambres de combustion de fusée, il a été résumé en 2001, dans un rapport technique [31].

Les conditions de combustion qui viennent d'être mentionnées sont très difficiles à reproduire dans des installations expérimentales. Il est donc difficile d'étudier les phénomènes physiques de base qui les sous-tendent dans le but d'augmenter les performances du système et d'assurer leur intégrité mécanique. Très peu d'installations expérimentales en Europe sont capables de reproduire l'environnement de combustion d'un moteur-fusée (Annexe A). Le banc MASCOTTE exploité par l'ONERA en France est dédié à la combustion de fusées cryogéniques, à la fois dans des conditions

supercritiques et sub-critiques. De nombreuses études ont été réalisées, utilisant principalement  $H_2 / O_2$  comme réactifs [32]. Le banc a ensuite été adapté à l'étude de la combustion du  $CH_4 / O_2$  [33]. En Allemagne, une expérimentation de DLR Lampoldshausen permet des études expérimentales sur la propulsion cryogénique, utilisant à la fois l'hydrogène ou le méthane comme carburant [34,35]. Récemment, l'Université Technologique de Munich (T.U.M) a fait un énorme effort dans l'étude de la combustion de  $CH_4 / O_2$  pour l'application de propulsion spatiale, fournissant plusieurs cas de test, avec diverses mesure de pression, température et fractions massiques [36].

Le fonctionnement de ces installations est coûteux et une instrumentation spécifique doit être conçue pour observer les phénomènes physiques présents dans une chambre de combustion sous pression. Pour cela, la simulation numérique reste un outil très prometteur qui permet d'approfondir la compréhension des phénomènes de combustion dans les moteurs-fusées et d'observer où les instruments n'ont pas accès. Utilisées en parallèle avec des expérimentations, elles permettent de fournir des réponses technologiques assez rapides, tout en contribuant à la compréhension plus complète du processus de combustion.

Afin de s'approcher au mieux des conditions de fonctionnement des moteurs fusées, tout en évitant les problèmes de détonation et/ou de retour de flammes, deux espèces inertes aux propriétés proches de celles de l'oxygène et de l'hydrogène ont été utilisées pour les expériences : il s'agit de l'azote et de l'hélium, qui sont plus simples à transporter et à manipuler que l'hydrogène et l'oxygène. L'azote présentant des caractéristiques similaires à l'oxygène (masse molaire et point critique), a été utilisé comme espèce alternative pour l'étude des caractéristiques d'atomisation des jets à l'intérieur des LRE, dans des conditions sous-critiques et supercritiques. La plupart des résultats expérimentaux non-réactives ont été obtenus au Laboratoire de recherche de l'Air Force (AFLR) et à l'agence spatiale Allemande (DLR) [37]. Il a été démontré que le croisement de la température critique ou de la pression critique affecte l'atomisation. Dans des conditions sub-critiques, en raison de l'action conjointe des forces aérodynamiques et de la tension superficielle, des ligaments et des gouttelettes se forment à la surface des jets de liquide. Dans des conditions supercritiques, la tension superficielle disparaît et les gouttelettes sont absentes de la surface des jets. Au lieu de cela, dans le cas d'une injection transcritique, une interface diffusive entre fluide dense et fluide léger se développe, où des vagues ou des structures peuvent se former. La figure 2.11 illustre ces observations. Pour une pression sous-critique, la désintégration du jet par atomisation est clairement visible. Par contre, pour une pression supercritique, l'interface devient plus diffuse et il n'y a plus de goutte. Ainsi, au lieu de deux phases distinctes, le jet coaxial évolue comme un jet monophasique avec de très grands gradients dans les thermophysiques.

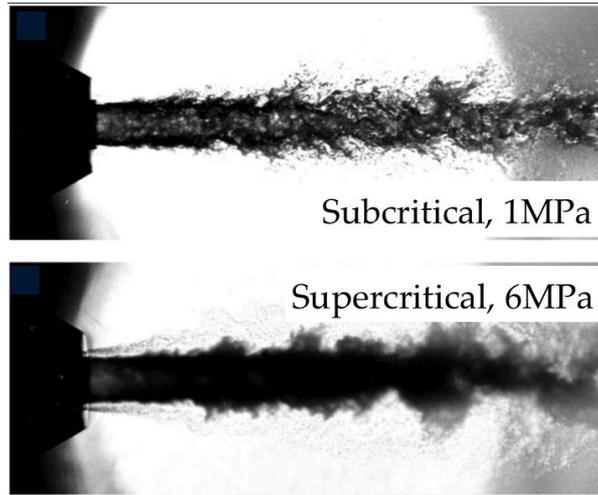


Figure 2.11: Visualisations du jet central N<sub>2</sub> entouré d'un jet annulaire He. (a) pression de la chambre sous-critique de 1 MPa. (b) pression de chambre supercritique de 6 MPa. [38]

Ce type de configurations a également été envisagé par [37] avec un jet d'azote dans une chambre d'azote gazeux au repos. La figure 2.12 illustre les différents comportements des jets à mesure que la pression augmente. À une pression sous-critique ( $P / P_c = 0,91$ ), le jet présente un comportement de pulvérisation diphasique classique, avec des ligaments et des gouttelettes. Lorsque la pression augmente, ( $P / P_c = 1,22$  et  $P / P_c = 2,71$ ), le jet dense se dissout dans le gaz ambiant sans génération de gouttelettes. À une pression réduite légèrement supérieure à l'unité ( $P / P_c = 1,22$ ), des structures "en forme de doigt (fingerlike)" se développent au bord du jet. À mesure que la pression augmente, le jet évolue de manière similaire à un flux de gaz turbulent à masse volumique variable. Dans cette direction, de nombreuses études ont été menées sur l'azote cryogénique dans un environnement d'azote supercritique [39, 40, 41]. La principale découverte de ces études était la forte influence de l'état thermodynamique, en particulier l'historique de la température du jet, sur le développement du jet en aval de la sortie de l'injecteur.

Dans le but de comprendre l'environnement complexe des chambres de fusée qui implique une bonne connaissance des phénomènes d'injection. Mayer *et al* [39] ont examinés les processus d'injection en régime supercritique à l'aide d'azote cryogénique au-dessus de la pression critique. Les différentes conditions d'essai prennent en compte des pressions de 4 à 6 MPa à deux vitesses cibles (2 et 5 m/s) et deux températures d'injection cibles (120 K et 130 K). Les données expérimentales prises par l'imagerie Raman 2-D ont permis les auteurs a comparés la masse volumique et l'angle de divergence avec les modèles de calcul. Ces paramètres fournissent beaucoup d'informations sur le développement du jet et le mélange avec le gaz environnant. Dans ces conditions d'essai, les profils de masse volumique montrent une tendance distincte vers un flux de jet auto-similaire dès la station axiale  $x/d = 25$ . Les profils axiaux de la masse volumique fournissent un aperçu considérable du développement du jet depuis le cœur potentiel jusqu'à la dissipation du jet. Lors de l'injection de fluide en dessous de la température critique ainsi qu'au-dessus de la pression critique, à mesure que le jet se réchauffe, il atteindra la température à laquelle  $C_p$  atteint une valeur maximale. Les petits

changements de température induisent des modifications beaucoup plus importantes de la masse volumique. Les auteurs ont associé la fluctuation de la température de  $N_2$  au transfert de chaleur à travers la paroi de l'injecteur. D'après l'analyse de la vitesse d'étalement, les auteurs ont conclu aussi que le taux de croissance de la couche de cisaillement et la distance radiale du fluide injecté s'éloigne du jet n'a aucune influence significative sur l'angle mesuré à partir de la procédure FWHM (Full Width Half Maximum) lorsque la masse volumique axiale est significativement plus élevée que la masse volumique dans la couche de cisaillement et le gaz ambiant. Ce résultat ressort de la méthode FWHM de détermination de l'angle d'étalement à partir des images Raman et des modèles informatiques et les angles résultants ne correspondent pas aux procédures visuelles notamment à proximité de l'injecteur.

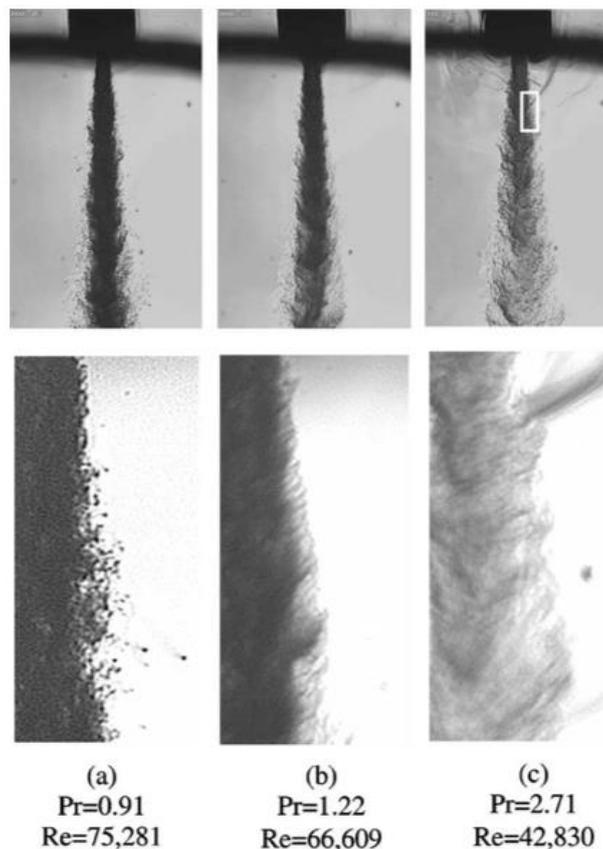


Figure 2.12 : Evolution d'un jet cryogénique de  $N_2$  dans une atmosphère de  $N_2$  au repos avec le rapport de pression  $P/P_c$ . [37]

De plus, Branam and mayer [42] ont constaté que les conditions d'écoulement et en particulier la masse volumique semblent être les plus affectées par les variations de température. Les variations de vitesse et de pression n'influencent que très peu, voire pas du tout, sur le champ d'écoulement dans ces plages de fonctionnement. Les auteurs ont conclu aussi que le transfert de chaleur de la paroi de l'injecteur au fluide avant l'injection avait un effet important sur l'intensité de la turbulence dans la zone de mélange et donc sur l'évolution du jet dans son parcours. En plus, les longueurs de cœur dense déterminées à partir des modèles de calcul correspondent assez bien à l'approximation empirique du jet de gaz de Harsha [43] et semblent être assez constantes sur ce rapport de masse volumique et la plage

de nombres de Reynolds. Un meilleur modèle empirique inclurait d'autres paramètres du débit influençant,  $\gamma$ ,  $\rho_\infty/\rho_0$  and  $T_0 / T_c$  pour fournir une meilleure corrélation avec les résultats. Aussi, les profils de température fournissent également des preuves du comportement attendu de l'angle d'étalement du jet. Ces profils suggèrent que l'angle d'étalement thermique du jet est initialement très grand près du point d'injection, puis tend vers une valeur constante.

Le comportement sub et supercritique des fluides est régi par les règles de la thermodynamique classique [44], où il est connu qu'au voisinage du point critique, la chaleur latente de vaporisation et la tension de surface de la phase liquide s'annulent. Par conséquent, on ne peut plus parler d'atomisation ou de vaporisation étant donné que ces phénomènes sont principalement inhérents à ces deux propriétés. Bellan [45] parle de « émissions » et de « désintégration » au lieu de vaporisation et atomisation.

Les mesures optiques appliquées à des configurations supercritiques, ont induit les expérimentateurs vers des confusions dans l'analyse des images recueillies ; celles-ci comportaient des zones sombres qui n'étaient (selon leurs interprétations) qu'une manifestation de la coalescence de gouttes de tailles importantes [46], comme cela l'est effectivement dans le régime subcritique. En réalité, les images reflétaient les importants gradients de masse volumique (étant donné que les mesures optiques se basent généralement sur l'indice de réfraction du milieu) dus à l'initialisation de la phase supercritique, qui voit apparaître des structures de fluide denses, comme ceci a été montré par Harstad *et al.*[47]. Aussi, il n'est pas du tout possible d'expérimenter avec des gouttes suspendues dans un environnement complètement supercritique. En effet, assurer une suspension voudrait dire qu'au moins, la surface de la goutte et son entourage proche sont dans un état sub-critique puisque celle-ci dispose d'une tension de surface minimale pour pouvoir s'accrocher et du coup, les mesures faites dans ces configurations ne sont en aucun cas révélatrices d'un comportement supercritique [48]. La plupart des travaux sur le comportement des gouttes en haute pression se résument au phénomène de vaporisation / émissions. Ceci revient au fait que dans ces cas de test, l'environnement proche de la goutte est à pression et température connues au préalable, ce qui n'est pas le cas pour des gouttes en combustion où même la localisation de la zone réactive est délicate à spécifier (manifestations des trois régimes de combustion : diffusion, prémélange et prémélange partiel) et que les conditions en proche-goutte sont totalement inconnues.

Dans des expériences utilisant l'eau, l'heptane et le fréon13, placés dans un environnement convectif d'air à haute pression, Savery [49] notait une augmentation continue de la température de la goutte au fur et à mesure que celle-ci se vaporise excluant ainsi, l'hypothèse de la quasi-stationnarité (énoncée pour dériver la loi du  $d^2$ ) à sa surface. Il remarque aussi que la surface de la goutte dépassait largement la température d'ébullition de la phase liquide, ceci ne peut s'expliquer que par le fait qu'en supercritique, la nature de la « dite goutte » n'est plus liquide et que sa température n'est plus limitée par sa valeur à l'ébullition.

Sous les mêmes conditions d'expérimentation de gouttes d'heptane dans un environnement d'azote gazeux, Sato [50], Morin *et al.* [51] dressaient les courbes de variation du diamètre (courbes  $d^2$ ) pour différentes pressions et températures réduites et montraient que le taux d'émission (pente des courbes) augmente avec la pression ce qui se traduit par une diminution de la durée de vie des gouttes. Les mêmes conclusions ont été tirées lors des expériences de Chesneau *et al.* [52] sur des gouttes d'oxygène liquide (LOx) dans l'air, bien que les conditions étaient subcritiques mais toujours en haute pression. Utilisant des brouillards polydispersés, ces auteurs remarquèrent que les taux de vaporisation n'avaient pas du tout la même tendance en haute pression quant aux gouttes ayant des diamètres différents et expliquèrent ceci par des transferts de chaleur et diffusions de masses différents en basses et hautes pressions. Ces auteurs ont été les premiers expérimentateurs à suggérer que le produit  $\rho D$  ne doit pas être constant et confirmaient les idées avancées par Harstad *et al.* [47].

Les investigations expérimentales sur les sprays et jets, révélaient un caractère beaucoup plus proche de la réalité des écoulements réactifs dans les chambres de combustion. Dans ce contexte, Krulle *et al.* [53], utilisant une injection d'eau dans l'air en haute pression (mais en sub-critique) et en observant l'interface liquide-gaz avec une caméra rapide, remarquent que le dard liquide était dépourvu des filaments qui représentaient classiquement les effets des instabilités de Rayleigh-Taylor. Cet effet devenait important au fur et à mesure que la pression augmentait, ce qui impliquait que les phénomènes d'atomisation primaire et secondaire commençaient à s'atténuer.

Le même type d'expérimentations dans un environnement supercritique d'air été conduit par Birk *et al.* [54] qui notaient que le cœur potentiel liquide (et du coup la longueur de pénétration du dard liquide) ne pouvait même pas être correctement défini (malgré l'utilisation des imageries en rayons-X). Les auteurs insistent sur le fait que ce comportement n'est pas seulement intrinsèque aux effets dans le jet liquide mais que la turbulence de l'environnement avait sa part.

Une vue plus détaillée sur le comportement en subcritique et supercritique du couple LOx/H<sub>2</sub> a été donnée par Mayer *et al.* [55], où la pression réduite variait de 1 à 10. Dans ces expériences, les auteurs ont fait émerger l'effet du rapport  $\rho_g u_g^2 / \rho_l u_l^2$  à l'injection sur le processus de désintégration (effet d'histoire) et rapportent que la température du gaz est d'une influence secondaire sur ce processus. Ils résument leurs investigations par dire que dans le cas subcritique, les gouttes sont présentes et le régime à ligaments persiste (atomisation primaire et secondaire) et qu'en transcritique, les ligaments laissent place à des filaments fins (threads, en anglais) dans la zone proche de l'injecteur mais se transforment en des parcelles de formes irrégulières en aval de cette zone. En régime supercritique, ces structures disparaissent très vite en « fondant » dans le fluide supercritique, ce qui confirmait que les notions d'instabilités de surface (Rayleigh-Taylor) ne peuvent être utilisées dans ce cas.

### ***Structure et dynamique des flammes supercritiques***

L'analyse de la combustion supercritique est principalement basée sur des images issues de rétro-éclairage et par les émissions du radical OH\* intégrés le long de la ligne de visée. Des exemples de

visualisations  $\text{OH}^*$  sont présentés dans les figures 2.13 et 2.14. Le processus de combustion est totalement différent de celui rencontré à basse pression car les notions d'atomisation et d'évaporation n'existent plus. Dans ces conditions, le processus de contrôle de l'écoulement est identifié à un transfert de masse entre la phase dense supercritique et le milieu environnant. Quant aux cas de mélange pur, les investigations expérimentales aux pressions supercritiques montrent des gradients de masse volumique élevés. Aucune goutte ni ligament n'est créé et des structures en forme de doigt très froissées sont dissoutes dans le jet de carburant environnant, comme illustré à la figure 2.15. On peut observer de grandes poches de fluide dense se mélangeant avec le gaz brûlé en aval. L'angle d'expansion de la flamme est également plus petit en régime supercritique qu'en régime sub-critique. Les gouttelettes pulvérisées à une pression sub-critique doivent s'évaporer avant de brûler, ce qui va conduire à des flammes plus larges. Aux pressions trans- ou supercritiques, la flamme coaxiale est plus mince et reste plus proche du jet d'oxygène froid et dense.

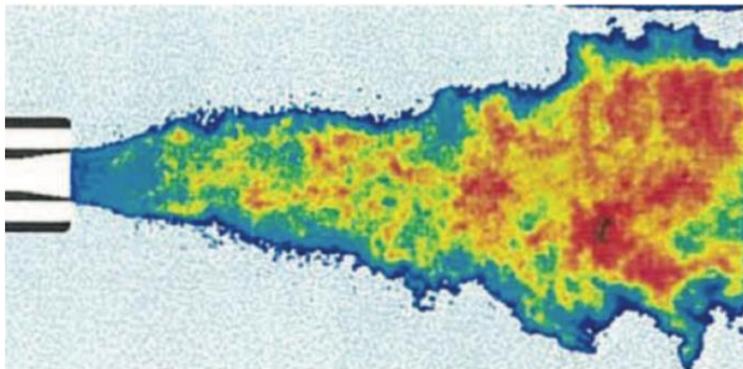


Figure 2.13 : Image instantanée de l'émission d' $\text{OH}^*$  d'une flamme cryogénique  $\text{H}_2/\text{O}_2$  à 6,3 MPa. [56]

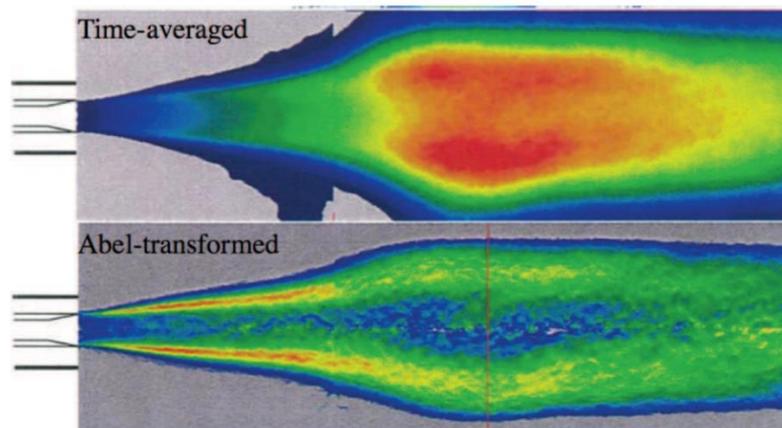


Figure 2.14 : Images du champ moyen et transformées d'Abel d'une flamme cryogénique  $\text{H}_2/\text{O}_2$  à 6 MPa. [57]

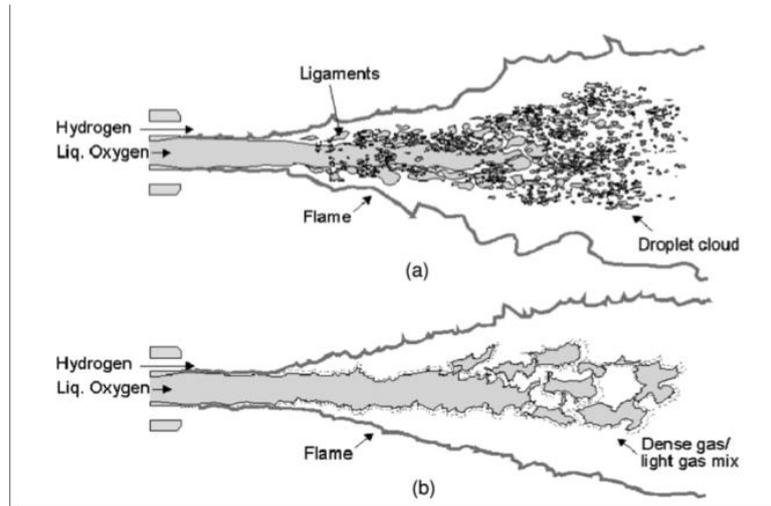


Figure 2.15 : Diagrammes de la structure de la flamme. (a) en dessous de la pression critique d'oxygène; (b) au-dessus de la pression critique d'oxygène. [32]

En comparaison avec la visualisation directe  $\text{OH}^*$ , moyennée dans le temps ou transformée par Abel, la technique de fluorescence induite par laser planaire (PLIF) fournit des images plus détaillées de la région de stabilisation de la flamme. Des images  $\text{OH}$  PLIF ont été obtenues par [56] dans le champ proche de l'injecteur pour une flamme  $\text{LOx}/\text{GH}_2$  à une pression  $P = 6,3 \text{ MPa}$ . Ils ont montré sur la figure 2.16 que la flamme est bien établie dans le sillage de la lèvre intérieure de l'injecteur coaxial.

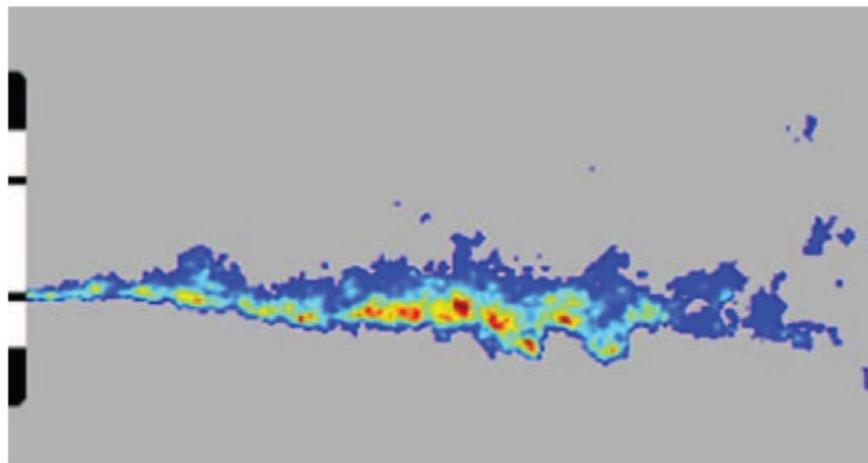


Figure 2.16 :  $\text{OH}$ -PLIF d'une flamme transcritique  $\text{LOx} / \text{GH}_2$  à 6,3 Mpa. [58]

Les mécanismes de stabilisation de la flamme influencent le comportement du moteur et peuvent entraîner de fortes oscillations de flamme, des fluctuations de pression et des anomalies de combustion. Des expériences [56, 59] sur des injecteurs cryogéniques coaxiaux  $\text{LOx} / \text{GH}_2$  ou  $\text{LOx} / \text{GCH}_4$ , ils ont clairement montré que cette dernière était bien établie dans la région proche de la lèvre d'injection, sans jamais la toucher (figure 2.17). Un zoom sur la zone de champ proche de l'injecteur est illustré à la figure 2.18. Ces visualisations ont montré que le maximum de l'émission  $\text{OH}^*$  se situe à une courte distance de l'ordre d'une épaisseur de lèvre de l'injecteur. Ce dernier oscille sur une distance de l'ordre d'une à deux épaisseurs de lèvre.

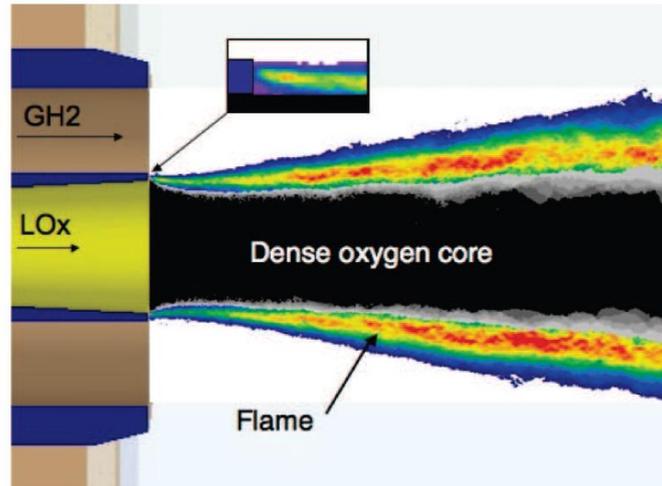


Figure 2.17 : Émissions OH\* de transformation d'Abel. Image agrandie du voisinage de la lèvres de l'injecteur. [59]

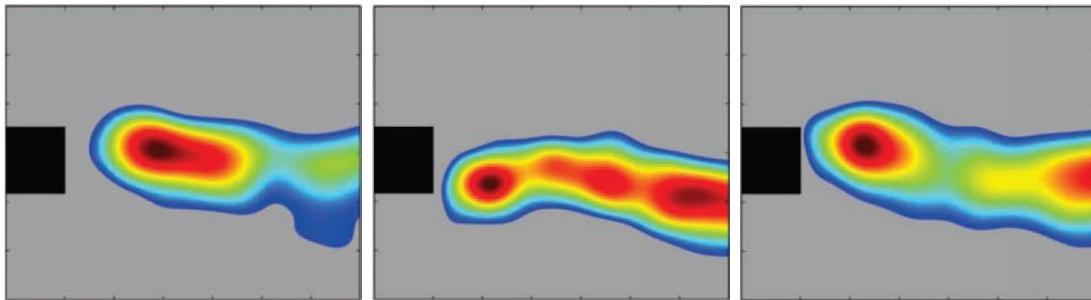


Figure 2.18: Image OH-PLIF de la région d'ancrage. Le flux de H<sub>2</sub> (O<sub>2</sub>) est au-dessus (ou en dessous) de la plaque de séparation à 6,3 MPa. [56]

Dans le comportement en combustion, la théorie classique (utilisée en subcritique) suppose que la zone de réaction s'étale sur la distance au bout de laquelle le brouillard (mélange à faibles gradients de densité entre vapeur de combustible et oxydant gazeux) est totalement converti en produits de combustion [60]. Cette notion ne peut guère être utilisée en supercritique à cause des gradients importants de densité notés lors de la phase d'initiation.

Seulement, si l'on pouvait capter l'ensemble spatial des points critiques du mélange (les points où la température et la pression sont égales à leurs valeurs critiques), il serait possible d'avoir une indication sur la flamme. Aussi, il est question de vérifier si le radical OH est bien un bon indicateur pour la zone réactionnelle, puisqu'en hautes pressions, l'hydroxyle (OH) voit sa durée de vie diminuer à cause des nombreuses collisions moléculaires, ce qui rend expérimentalement sa détection difficile [55].

A cause de la nature explosive du mélange LOx/H<sub>2</sub>, les tests expérimentaux en supercritique sont relativement rares. Néanmoins, on peut citer les tests de Mayer *et al.* [55] et ceux de Ivancic *et al.* [61], qui ont permis de donner une idée sur la position de la flamme qui s'avérait se situer sur une zone de mélange entre les deux fluides et qu'apparemment, celle-ci (flamme) restait accroché aux

lèvres de l'injecteur en maintenant sa position grâce à une intense zone de recirculation. Aussi, le sillage créé par les lèvres de l'injecteur (coaxial) s'étalait en aval de la zone d'injection et contribuait fortement au phénomène de mélange turbulent [55].

Un flux de jet a trois zones distinctes, un cœur potentiel, une région de développement ou de transition et une région auto-similaire, comme le montre la figure 2.19. Le cœur potentiel contient une partie constituée uniquement de fluide injecté et réduit en épaisseur dans la direction axiale lorsque le jet se mélange avec le fluide du milieu environnant. La longueur du cœur potentiel ( $x_c/d$ ) est la distance à laquelle les propriétés de la ligne centrale restent relativement constantes (en particulier, la masse volumique). Schetz [62] a suggéré qu'il y a peu ou pas de cœur potentiel pour les jets entièrement développés. Cependant, il a fourni une approximation empirique de la longueur de Harsha [43] :

$$X_{ct} / d = 2.13 \text{Re}_d^{0.097} \quad (2.6)$$

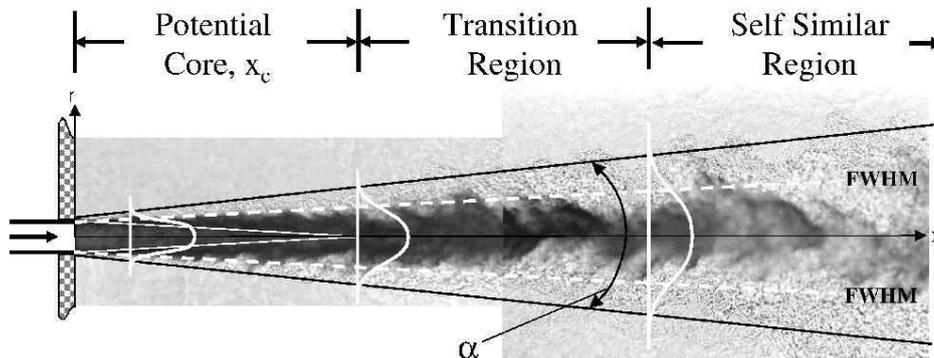


Figure 2.19 : Les différentes zones d'un flux de jet [42]

Ces conditions d'écoulement sont entièrement développées, un écoulement turbulent dans l'injecteur ( $3.3 \times 10^4 < \text{Re}_d < 1.79 \times 10^5$ ) injecté dans une chambre sous pression à température ambiante, mais un cœur potentiel distinct en raison des masses volumiques élevées au niveau de l'injecteur est toujours attendu. Chehroudi et al. [63] ont offert une représentation empirique basée sur le rapport de masse volumique prédisant des valeurs significativement plus grandes que les valeurs prédites par Harsha [43] pour le flux du cœur potentiel comme :

$$X_{ct} / d = C(\rho_0 / \rho_\infty)^{\frac{1}{2}} \quad (2.7)$$

où  $11 \geq C \geq 3,3$  représente une constante empirique du modèle.

Le modèle proposé par Chehroudi *et al.* [63] est dérivé du cœur intact des sprays liquides mais a été utilisé pour la comparaison avec ces conditions de test supercritique. Après la région du cœur potentielle, le jet est dans un état de transition, qui est considéré comme la région de mélange turbulent pour un jet. Dans cette région, la dissipation d'énergie et le comportement du jet ont tendance à présenter le plus grand intérêt pour le mélange. Les chercheurs ont indiqué que les influences les plus importantes sur le développement du jet comprennent le rapport de vitesse entre la vitesse initiale du

jet et le milieu environnant ( $u_0/u_\infty$ ) ainsi que le rapport de masse volumique ( $\rho_0/\rho_\infty$ ). Ces paramètres montrent comment la quantité du mouvement se dissipe du jet dans le champ d'écoulement. Pour les jets cryogéniques, les différences thermiques ont également un effet significatif. L'examen des profils de température et de masse volumique à divers emplacements axiaux donne un aperçu des phénomènes de transfert de chaleur et de son influence sur ces jets.

À une certaine distance du plan d'injection, le jet devient similaire. Cela signifie qu'une fonction d'une seule variable peut exprimer les profils de champ d'écoulement comme ne variant plus dans la direction axiale. Schetz [62] a déclaré que cela se produit à environ  $x/d \geq 40$ , tandis que d'autres ont indiqué que, pour des jets similaires, les profils de vitesse présentent un comportement auto-similaire aussi proche que  $x/d \geq 20$  [64]. D'autres paramètres tels que les intensités de turbulence ( $u'$ ;  $v'$ ;  $w'$ ) peuvent ne pas montrer ce comportement bien après  $x/d \geq 200$ .

La masse volumique de la ligne axiale est une forte fonction de la distance axiale par rapport à l'injecteur. Lorsqu'elle est tracée sur une échelle logarithmique (log-log), il est beaucoup plus facile de déterminer la longueur du cœur liquide et de voir les différentes régions du jet comme sur la figure 2.20. L'endroit où la masse volumique commence à diminuer rapidement détermine la longueur du noyau liquide ( $x_{ct}/d$ ).

Branam et Mayer ont fourni une mesure des échelles de longueur en analysant les images de l'ombre et l'ont appelé «l'échelle de longueur visible». Plus de détails sur leur analyse d'image peuvent être trouvés dans Branam et Mayer [42]. La figure 2.21 montre la comparaison des valeurs obtenues à partir des modèles calculés, la relation du nombre de Reynolds de Harsha [43] et la relation offerte par Chehroudi et al. [63], ainsi que les valeurs déterminées à partir des images Raman 2D. Les deux lignes identifient l'intervalle Chehroudi *et al.* pour le coefficient donné dans leur relation. Les valeurs calculées concordent mieux avec la relation empirique de gaz suggérée par Harsha [43] mais ont tendance à tomber à ou en dessous de la limite inférieure suggérée par Chehroudi *et al.* [9]. La longueur de noyau déterminée à partir des images Raman montre une bonne variabilité sur cette plage de masse volumique, principalement en raison de la qualité des images Raman 2D. Les valeurs expérimentales montrent un certain écart par rapport aux résultats du modèle mais suivent la même tendance.

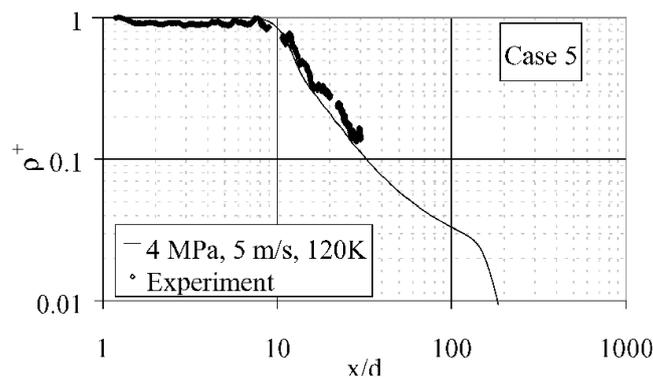


Figure 2.20 : Masse volumique sur l'axe centrale [42]

L'accord des calculs de la longueur du cœur sur un jet de gaz suggère que le jet cryogénique sous pression supercritique se comporte de manière très similaire à un jet de gaz, mais la relation de Harsha [43] ne prend en compte que le nombre de Reynolds. Pour considérer d'autres facteurs contribuant à ces conditions d'écoulement, une analyse analytique réalisée par Branam and mayer [42], utilisant le rapport des chaleurs spécifiques  $\gamma$ , le rapport de masse volumique ( $\rho_\infty/\rho_0$ ), température ( $T_0/T_c$ ) et pression ( $P_0/P_c$ ) se révèle très utile. Pour séparer l'interdépendance entre le nombre de Reynolds et le rapport de masse volumique, la masse volumique ambiante est utilisée pour le calcul des nombres de Reynolds ( $Re_\infty$ ) dans cette analyse. Les résultats sont présentés dans l'équation suivante ainsi que sur la figure 2.21 (corrélation).

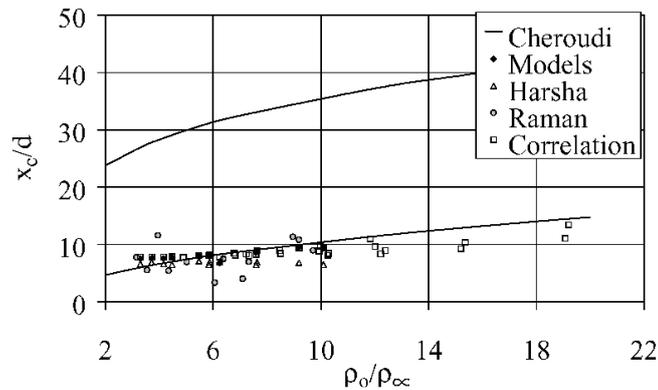


Figure 2.21 : Longueur du cœur dense [42]

Cette relation a un coefficient de corrélation de 0,976. Le petit coefficient d'échelle ( $3,344 \times 10^{-5}$ ) suggère que la relation varie très peu dans ces conditions de test. Les contributeurs les plus importants dans cette équation sont le nombre de Reynolds et le rapport de masse volumique. Lorsque le rapport de masse volumique est très faible (masse volumique d'entrée très élevée), il a une contribution plus importante que le nombre de Reynolds, ce qui suggère que le rapport de température jouerait également un rôle majeur. Même si le coefficient du rapport de température est important, la plage du rapport de température (0,8 – 1,1) limite l'influence de ces conditions d'essai. Le rapport des chaleurs spécifiques semble contribuer davantage à la relation, mais dans une méthode inverse. À des valeurs élevées pour ce rapport (près de la température critique), cette relation réduit le résultat vers la deuxième constante 7,363. Cette relation ne peut être considérée comme valable que pour ces conditions d'essai sur les plages de pression, de température et de vitesse définies dans le tableau 1. L'équation est [42]:

$$X_{ct} / d = 3,344 \times 10^{-5} Re_\infty^{0.5597} \left(\frac{\rho_\infty}{\rho_0}\right)^{-3.179} \gamma^{-0.9934} \times \left(\frac{T_0}{T_c}\right)^{5.987} \left(\frac{P_0}{P_c}\right)^{-0.5043} + 7,363 \quad (2.8)$$

### 2.3.2. Etudes numériques

Faire fonctionner des installations expérimentales ou reproduire des écoulements propulsifs, en particulier dans ces conditions extrêmes de pression, n'est pas évident sur le plan expérimental quelle que soit l'échelle. Pour cette raison, la simulation numérique reste une approche prometteuse pour la

compréhension de la physique de combustion des fusées et a pour perspectives de devenir un outil de conception clé dans l'industrie.

Selon l'effort de modélisation requis, différentes méthodologies de simulation de la dynamique des fluides computationnelle (CFD) peuvent être utilisées pour résoudre l'ensemble d'équations Navier-Stokes réactives. Les méthodes sont classées comme simulation numérique directe (DNS) où toutes les échelles de turbulence sont résolues, simulations moyennées de Reynolds (RANS) où seules les échelles de l'écoulement moyen, sont résolues alors que la turbulence est entièrement modélisée ; ajoutons la simulation à grandes échelles (LES), qui résout le mouvement turbulent des tourbillons filtrés sur la taille des mailles, les tourbillons des sous-grilles étant modélisés.

Même si la DNS de configurations entièrement réalistes n'est pas encore abordable, les configurations académiques (nombre de Reynolds modéré) sont désormais étudiées en utilisant le calcul haute performance [65]. C'est ainsi que Miller *et al.* [66], Oefelein *et al.* [67], résoudre les équations du même modèle que celui de Harstad et Bellan [47] en menant des DNS sur le couple  $H_2/O_2$ . Le DNS est aujourd'hui utilisé principalement pour comprendre les phénomènes physiques de la combustion turbulente et aide à construire des modèles, en générant une base de données [68, 69] pour les approches LES et RANS. Un exemple un peu récent d'une telle base de données a été proposé par Ruiz *et al.* [70] où un cas-test numérique 2D non réactive a été proposé, prenant en compte des écoulements supercritiques à grand nombre de Reynolds avec des gradients élevés de masse volumique.

La plupart des études numériques sur la combustion de fusées ont été réalisées avec la méthode RANS, grâce à son faible coût de calcul. Une partie importante de celui-ci concerne l'atomisation et l'évaporation du jet d'oxygène liquide [71], la combustion non prémélangée à écoulement diphasique [72] et les effets de gaz réels sous pression critique [73]. Plusieurs auteurs ont réussi à reproduire les propriétés d'écoulement moyennes dans des conditions non réactives et réactives [74-76]. Les méthodes RANS sont désormais massivement utilisées dans le dimensionnement des chambres de combustion, mais leurs limites et l'augmentation des ressources de calcul poussent vers une simulation plus précise.

De nos jours, les études de simulation des grandes turbulences (LES) sur la chambre de combustion des fusées ne sont pas nombreuses, mais de nombreux progrès ont été réalisés. Les instabilités thermo-acoustiques [77], la séquence d'allumage [78] ou la stabilisation transcritique des flammes dans les brûleurs réels [79], les flammes à jet supercritique [80] en sont des exemples d'utilisation réussie des LES.

Dans ces investigations, les auteurs utilisaient leurs propres codes de calcul (non décrits de manière consistante dans leurs travaux), mais leurs analyses convergeaient toutes, au fait que la diffusion avait une grande part dans le contrôle du mélange et de la combustion et que le comportement supercritique ressemblait beaucoup plus à celui d'une phase gazeuse, mais dense.

Très rares sont les investigations dans le domaine supercritique menées par le biais de codes de calcul commerciaux. Dans ce contexte, on peut citer le travail de Poschner *et al.* [75] et Pohl *et al.* [81] qui utilisaient le code Ansys-CFX<sup>®</sup> pour simuler une flamme de diffusion de type LOx/GH<sub>2</sub> et celui de Minotti *et al.* [82] et De Georgi *et al.* [83] qui s'intéressaient à la combustion supercritique du couple LOx/CH<sub>4</sub> par le biais du code commercial Ansys-Fluent<sup>®</sup>.

Les simulations numériques sur le spray sont aussi nombreuses. Elles sont souvent séparées en deux catégories : l'une avec une formulation Lagrangienne et l'autre avec une formulation Eulérienne [84]. Dans la formulation Lagrangienne, chaque goutte est suivie indépendamment, l'évolution de sa vitesse, sa position et sa taille sont résolus puis couplés avec la simulation de la phase gazeuse [85]. Dans la formulation Eulérienne, deux systèmes d'équations sont résolus, l'un pour la phase liquide et l'autre pour la phase gazeuse [86], avec des transferts de masse, de quantité de mouvement, d'espèce et d'énergie ont lieu entre les différentes phases.

Ces études numériques sont relativement récentes et leur nombre reste limité car les données expérimentales permettant de guider les modèles sont elles aussi limitées. Les calculs non réactifs d'injection d'azote liquide dans une atmosphère d'azote à haute pression [37, 39], ont souvent été reproduits par différentes équipes [87, 88] par simulation aux grandes échelles (LES). Des simulations RANS ("Reynolds Average Navier-Stokes") ont également été effectuées [89, 90]. Ces recherches ont révélé l'importance de tenir compte des non-idéalités thermodynamiques, pour pouvoir obtenir des résultats précis.

Une configuration complexe comportant l'injection, le mélange et la combustion dans des conditions supercritiques a été étudiée dans les travaux de Kim *et al.* [91]. Les auteurs ont signalé une différence significative entre la masse volumique du gaz réel et du gaz idéal pour les régions proche de l'injecteur et suivant l'axe de la chambre. L'accent doit être mis sur le fait que la plupart des investigations numériques ont considéré l'état adiabatique à la fois pour les parois de l'injecteur et la chambre.

En tenant compte du transfert de chaleur entre la paroi de l'injecteur et le flux de fluide pur N<sub>2</sub>, Banuti *et al.* [92, 93] ont effectué un calcul RANS en utilisant à la fois des conditions aux limites adiabatiques et à température constante. Les mêmes auteurs ont confirmé que la longueur de l'écoulement à cœur dense était prédite avec plus de précision par rapport aux expériences, lorsque la condition aux limites isothermes était prise en compte. Ils ont également déclaré que le transfert de chaleur de l'injecteur sert de phénomène mécanique qui aide à la désintégration des fluides et contribue par conséquent à réduire le cœur dense. Les auteurs ont conclu qu'aucun calcul de CFD n'a réussi à prédire avec précision le cœur dense stabilisé [92, 93]. Dans le même contexte, les simulations LES sur injection d'azote ont révélé une forte dépendance de l'intensité de la turbulence aux échanges thermiques entre le fluide et la paroi de l'injecteur [94]. Selon l'inférence des auteurs, certaines réflexions sont toujours en cours sur la modélisation de transfert de chaleur par l'injecteur et sur son influence sur l'évolution du cœur dense. De plus, les recherches expérimentales concernant l'injection

cryogénique ont révélé l'importance de prendre en compte le transfert de chaleur de la paroi de l'injecteur vers le flux de fluide [39].

De nombreuses recherches ont été menées dans une configuration d'injecteur coaxial comme sur la figure 2.17 où un jet d'oxygène transcritique est entouré d'un jet annulaire d'hydrogène ou de méthane supercritique comme dans [80-83]. Oefelein *et al.* [67] ont choisi une approche détaillée et le domaine numérique ne couvre que le voisinage immédiat de l'injecteur coaxial. Il a été démontré qu'en raison de la faible diffusion de l'oxygène transcritique, un mélange riche apparaît dans la couche de cisaillement. La présence simultanée d'une zone de recirculation forte, de gaz brûlés chauds et de ce mélange riche permet à la flamme de s'accrocher fermement à la pointe de l'injecteur. Toutes ces études confirment que la combustion a lieu en régime de flamme de diffusion. Cependant, dans [95], il a été montré que des poches riches en réactifs partiellement pré-mélangées peuvent se détacher de la plaque de séparation, se déplacer vers l'aval et finalement brûler pendant un processus d'engloutissement dans l'oxygène dense, dans des structures "en forme de doigt" (figure 2.22).

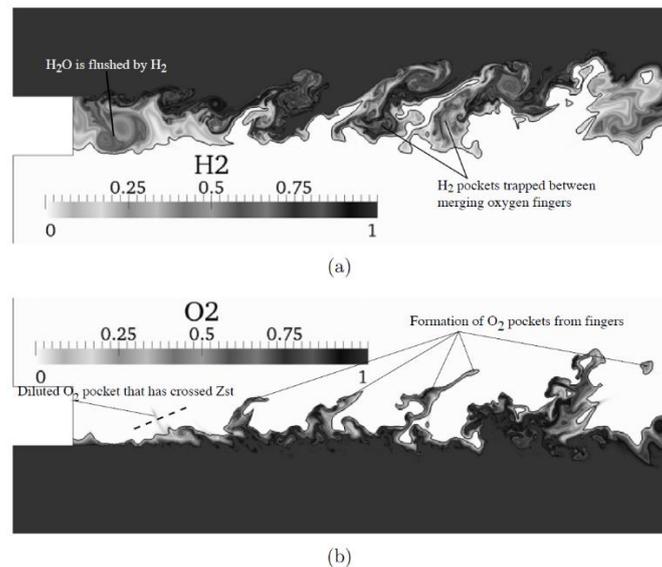


Figure 2.22 : Champs instantanés de (a) fraction massique d'hydrogène et (b) d'oxygène, avec fraction de mélange stœchiométrique superposée isoline (noir). [95]

La stabilisation de la pointe de la flamme au niveau du bord de l'injecteur a été confirmée par Juniper *et al* [59], les auteurs ont identifié que le processus d'ancrage à la flamme est essentiellement déterminé par le rapport  $\psi$  de la hauteur des lèvres sur l'épaisseur de la flamme. Lorsque  $\psi > 1$ , le bord de la flamme est coincé derrière la lèvre et la flamme est stable. Par contre, lorsque  $\psi < 1$ , la flamme est plus épaisse que la lèvre et, comme elle devient sensible à l'écoulement à grande vitesse, elle peut être instable ou emportée. Les deux situations sont représentées sur la figure 2.23.

Des travaux très récents sur l'oxygène transcritique et le méthane supercritique dans une injection coaxiale 3D [96] utilisent une hypothèse de modèle de chimie infiniment rapide. La flamme se trouve stable dans la région proche de la lèvre de l'injecteur avant de se froisser sous l'effet des structures

turbulentes créées par le jet. La structure globale de la flamme parait en bon accord avec celle de Singla *et al.* [33].

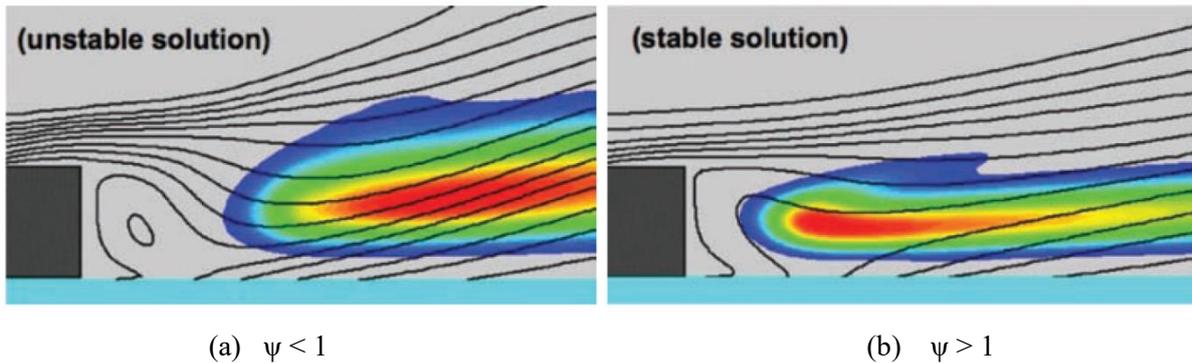


Figure 2.23 : Configurations de flux à différentes valeurs de  $\psi$ . [59]

Les études numériques sur les flammes unidimensionnelles  $H_2/O_2$  en régime trans- et supercritique de Ribert *et al.* [97], Giovangigli *et al.* [98] et d'autres groupes de chercheurs [99, 100] ont montré que l'épaisseur d'une telle flamme est de l'ordre du micromètre, ce qui complique encore plus les simulations et peut par conséquent être décrite comme une flamme tendue.

Dans la région des flammes, la température est très élevée et il a été conclu que les effets réels des gaz ont une influence négligeable. De plus, comme le nombre de Damkohler est grand, l'hypothèse de flammelle est valable pour décrire la flamme, et le taux de dégagement de chaleur par unité de surface de flamme est proportionnel à la racine carrée du taux de déformation et de la pression [59].

L'approche RANS a été utilisée par différents auteurs dans la combustion supercritique du couple  $H_2/O_2$ , [Poschner *et al.* [75], Benarous *et al.* [101], Pohl *et al.* [81] et Benmansour *et al.* [102]] et le couple  $CH_4/O_2$  [Minoti *et al.* [82]; De Giorgi [83]] et d'autres qui ont utilisé une description des gaz réels à travers les équations cubiques de Peng-Robinson (PR) ou Soave-Redlich-Kwong (SRK), avec des corrections. Ces corrections étaient dans le but de rattraper le décalage que constituent ces lois par rapport aux mesures expérimentales. Alors que, ces corrections ne concernent que quelques points sur l'évolution totale de la masse volumique sur les intervalles considérés, cela conduit généralement à une masse volumique du mélange souvent sous-estimée. La flamme résultante dans plusieurs cas est donc de longueur surestimée. Certains travaux ont été consacrés à la prévision des écarts de masse volumique pour diverses équations d'état (EoS). Les descriptions les plus populaires étaient basées sur les équations d'état thermodynamiques de SRK et de PR [91]. Dans des conditions totalement supercritiques, SRK était considéré comme l'EoS le plus précis, où l'équation PR a révélé une surestimation importante de la masse volumique, en particulier dans la région proche de l'injecteur, en raison de la température sous le point d'ébullition [83]. Ce comportement est plus prononcé dans des conditions d'écoulement non-réactif, où le mélange turbulent entre les propergols a lieu avant l'inflammation. Pohl *et al.* [81] ont considérés les effets du gaz réel pour une étude de combustion  $H_2/O_2$  pour le cas supercritique du Mascotte (point A60), où ils ont utilisés deux tables de flammelles qui consistent à un cas du nombre de Lewis unitaire et l'autre cas d'une table mixte de flammelles,

où la diffusion différentielle n'était envisagée que dans la zone de flamme. Les auteurs ont conclu en ce qui concerne la forme et la longueur de la flamme par rapport à la concentration en  $\text{OH}^*$  mesurée expérimentalement, l'existence d'un bien meilleur accord pour le cas du gaz réel combinée avec une table mixte de flammelettes, que pour le cas du nombre de Lewis unitaire (figure 2.24).

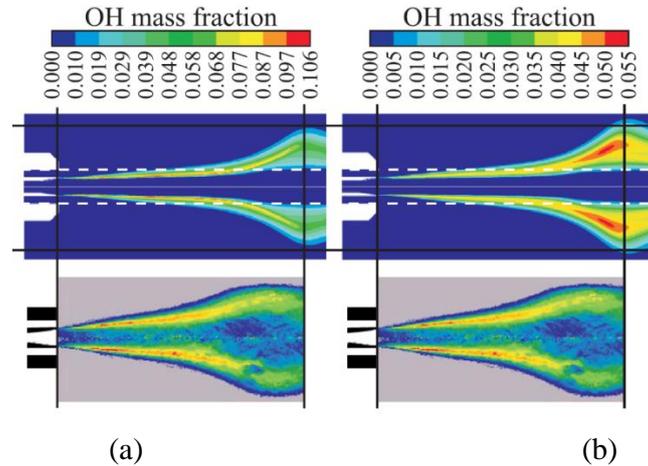


Figure 2.24 : Champ instantané de l'émission du radical  $\text{OH}^*$  [103], Concentration du radical OH des calculs CFD de Pohl *et al.* [81] ; (a) diffusion différentielle dans la zone de flamme (b) Nombre de Lewis  $Le_i = 1$

Une autre approche différente de la méthode RANS traditionnelle a été développée par Demoulin et Mura [104] et appliquée au cas d'un injecteur coaxial. La fraction de mélange est la seule grandeur à être transportée. Les autres grandeurs thermo-physiques sont calculées à partir d'une fonction de densité de probabilité. Dans ce cas le temps de calcul est considérablement réduit bien que le résultat de la transformée d'Abel ne corresponde pas parfaitement à la concentration de OH, figure 2.25, et la longueur de la flamme est surestimée.

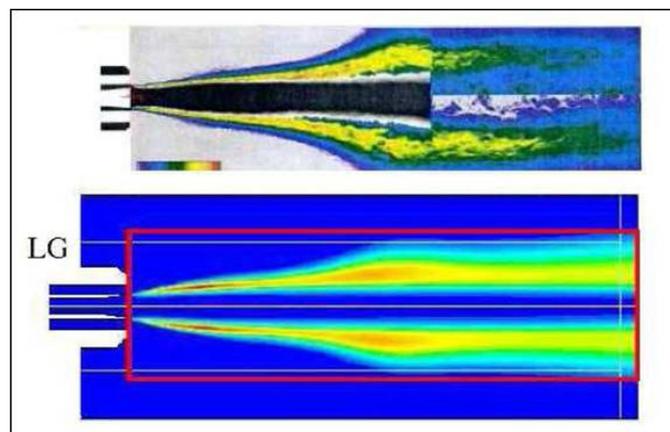


Figure 2.25 : Concentration du radical OH, (haut) Expérimental, (bas) Simulation [104]

Des cas réactifs ont été réalisés par LES depuis les années 90, [105,106] où les processus de mélange à haute pression et de combustion sont traités sur une configuration de plaque de séparation avec et sans transfert thermique. Plus récemment, [96] plusieurs configurations ont été simulées à l'aide de modèles de combustion simples (quasi-laminaire ou à l'équilibre) pour la contribution à

l'échelle de sous-maille des termes sources chimiques. Ribert *et al.* [107] ont proposé quant à eux une fermeture basée sur une méthode de tabulation [108] de flammelettes supercritiques et mis en exergue le problème lié à l'utilisation d'une équation d'état de type gaz parfait [109] ou gaz réel [110] dans le cadre de la LES. En effet, pour les LES d'écoulements multi-espèces, la pression filtrée spatialement doit être évaluée. L'écoulement n'étant pas homogène dans le volume considéré, l'équation d'état liant la pression, la masse volumique, la température et les fractions massiques des espèces ne devrait pas être directement appliquée à leurs valeurs résolues sur la maille LES. En pratique, les corrélations non résolues entre ces grandeurs sont généralement négligées dans le calcul de la pression filtrée à partir de champs résolus. Ce point semble ne plus fonctionner pour la combustion supercritique ou dans le cadre d'équations d'état de type gaz réel.

#### 2.4. Conclusion

Toutes ces expériences démontrent un changement radical de comportement entre une injection basse pression classique et une injection trans- ou supercritique. La présence de plusieurs composants, celle de dynamique, thermodynamique ou de combustion complexifient d'autant plus l'étude de la combustion en générale dans un moteur fusée. Les distorsions optiques dues à des gradients de masse volumique importants, très présents dans les chambres hautes pressions ont limité les analyses et les apports d'informations quantitatives. Il est donc nécessaire de continuer les études expérimentales sur le sujet en apportant des informations complémentaires et quantitatives à celles déjà existantes. L'utilisation de différents calculs en CFD est essentielle pour parvenir à comprendre tous les phénomènes mis en jeu. Pour cela une modélisation des équations principales dans un calcul numérique est nécessaire. Dans le chapitre qui va suivre, on présentera les différents modèles physiques (EoS, dynamique, turbulence, transfert de chaleur) qui ont permis de reproduire quelques résultats importants générés par des travaux expérimentaux de référence.

## **Chapitre 03**

# **Modélisation de l'écoulements des ergols et thermodynamique du mélange**

### 3. Chapitre 03 : Modélisation de l'écoulements des ergols et thermodynamique du mélange

#### 3.1. Introduction

Ce chapitre présente les grandeurs et les équations nécessaires pour la réalisation de simulations numériques d'écoulements réactifs et non-réactifs en régime trans et supercritiques. Ces simulations ne peuvent se présenter sous l'angle d'une solution unique du fait de l'interaction de plusieurs phénomènes, il est nécessaire de s'assurer que les modèles utilisés permettront de traiter tous les phénomènes rencontrés. La première partie des modèles dynamiques définit les équations de conservation pour l'aérothermochimie dites de Navier-Stokes. Dans la seconde partie, les équations sont moyennées pour obtenir un système d'équations pour la description du mouvement statistique de l'écoulement turbulent avec introduction des termes de correction pour le modèle de turbulence retenu. Les propriétés thermodynamiques requises pour ces simulations sont introduites avec une modélisation des équations d'état non-idéale (gaz réel) pour les applications supercritiques où l'utilisation de ces équations (EoS) est cruciale. L'influence du passage du régime transcritique au régime supercritique impose une définition rigoureuse des propriétés thermo physiques principalement au point critique et l'absence des tensions surfaciques compromet l'utilisation de modèles d'atomisation et vaporisation pour l'injection des fluides cryogéniques. La dernière partie de ce chapitre présente différentes modèles de la cinétique réactionnelle utilisés pour les flammes non-prémélangées turbulentes. La méthodologie adoptée considère les différentes caractéristiques typiques dictées par la recherche expérimentale.

L'étude du mélange dans les moteurs à ergols liquides est généralement basée sur les notions de combustion turbulente d'un oxydant stocké sous forme liquide, puis injecté directement à cet état dans la chambre de combustion. Le comburant liquide est alors dispersé sous la forme d'un nuage de gouttelettes (ou spray) tout en s'évaporant. Le système est alors composé de deux phases distinctes et se classifie dans la catégorie des écoulements diphasiques.

Les écoulements diphasiques peuvent être subdivisés en fonction de la topologie des deux phases. On peut citer par exemple, les écoulements à surfaces libres, les écoulements dans les milieux poreux et également, les écoulements fluide-particules comme c'est le cas dans les moteurs fusée à ergols solides. Dans la classe de moteurs qui nous intéresse, l'écoulement fluide-particule est constitué d'une première phase fluide gazeuse et d'une autre phase comportant un liquide non miscible. Cette dernière est généralement considérée être constituée de plusieurs volumes compacts distincts et décrite comme étant une phase « dispersée », la phase « continue » étant le fluide (gaz) porteur. En fonction des systèmes d'injection, la combustion peut avoir lieu soit au milieu du spray soit ultérieurement au sein de la vapeur du combustible.

Afin de mieux prédire le comportement de l'écoulement réactif dans la chambre de combustion d'un moteur fusée à ergols liquides, il est crucial de comprendre et de pouvoir prédire et quantifier

l'ensemble des processus physiques se déroulant depuis l'injection du liquide dans la chambre jusqu'à la combustion. Le schéma présenté ci-dessous (figure 3.1) résume la majeure partie des phénomènes en présence, par le biais de quatre intitulés principaux :

Le Spray : Afin de simplifier le diagramme, la phase de pulvérisation du liquide n'est pas abordée en détails. Dans un premier temps, il s'agit d'être à même de caractériser les propriétés du spray à la fois au niveau de l'injection (distribution de la taille, de la vitesse, de la température du liquide) mais aussi au sein de l'écoulement (interaction gouttes/parois, gouttes/gouttes, etc). De plus, la taille des gouttes variant au cours de leur existence, leur dynamique au sein de l'écoulement peut varier fortement.

L'évaporation : Les phénomènes d'évaporation peuvent s'avérer très différents en fonction des propriétés de la phase porteuse. En effet, si le spray est injecté dans une chambre où règne une température et une pression relativement uniformes, alors les gouttelettes atteindront très vite leur niveau de saturation et s'évaporeront en suivant un loi relativement simple (diminution linéaire de la surface). En revanche, si de fortes variations de la température ou de la pression sont présentes dans la chambre, les lois d'évaporation deviennent très complexes et propres à chaque goutte de l'écoulement.

Le mélange : Un des phénomènes essentiels au sein des chambres de combustion concerne la turbulence, qui agit à tous les niveaux, dispersion du spray, micro-mélange turbulent et mélange aux grandes échelles de la vapeur de combustible avec l'oxydant et enfin, mélange éventuel des gaz brûlés au sein du spray affectant fortement les phénomènes d'évaporation.

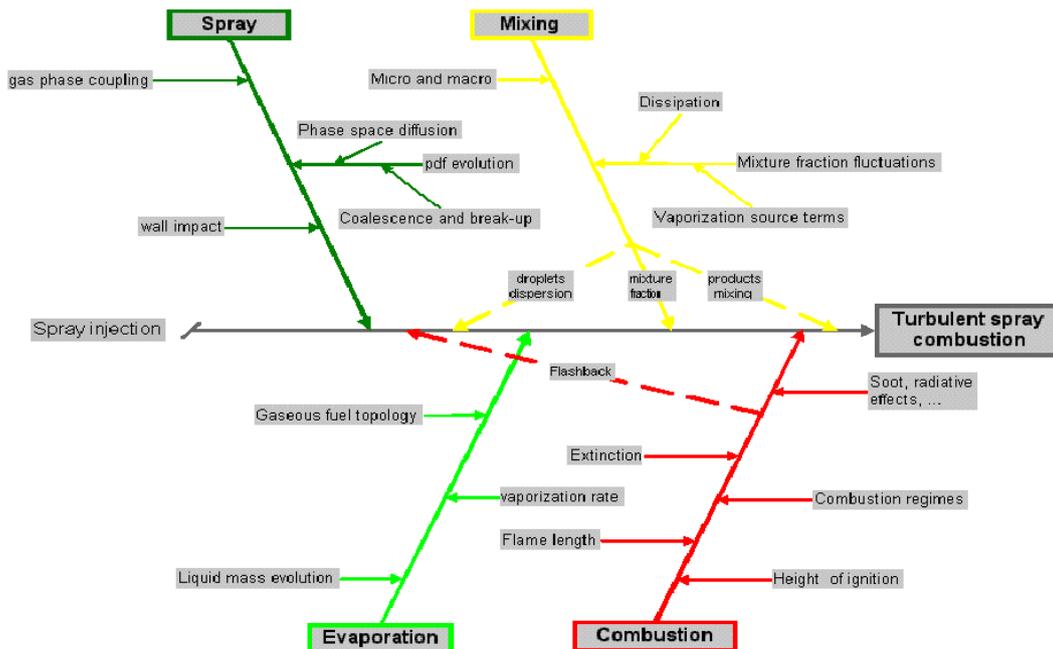


Figure 3.1 : Phénomènes intervenant lors de la combustion en milieu diphasique [111].

La combustion : Et vient alors, la combustion aura lieu au sein du combustible évaporé. Tous les régimes de combustion (prémélangé, non-prémélangé) peuvent se rencontrer dans la chambre de combustion.

### 3.2. Modèles dynamiques

#### 3.2.1. Equations gouvernantes et moyennement

La turbulence est un phénomène présent dans la plupart des situations pratiques, notamment dans les chambres de combustion. Ce phénomène apparaît lorsque les gradients de vitesse augmentent de telle sorte que la viscosité du fluide ne peut plus dissiper les petites perturbations et maintenir le caractère laminaire de l'écoulement.

L'expérience a montré que les trajectoires des particules fluides et les caractéristiques locales de l'écoulement ne sont pas intégralement reproductibles, par contre, certaines quantités « moyennes » le sont. Les mesures des valeurs moyennes de vitesse, d'énergie cinétique, de température ou de concentration des espèces montrent qu'elles sont reproductibles. De la même manière, toutes les quantités statistiques qui peuvent être définies, moyennes, variances ou corrélations entre différentes grandeurs, sont reproductibles. De ce fait, les variables caractéristiques de l'écoulement sont représentées par une quantité fluctuant autour d'une quantité moyenne :  $g = \bar{g} + g'$ , où  $\bar{g}$  est la moyenne de Reynolds. Les moyennes peuvent être assimilées à des moyennes temporelles (si l'écoulement est stationnaire en moyenne) ou spatiale (s'il existe des directions homogènes) mais de façon générale, il s'agit de moyennes statistiques. A partir des équations d'évolution des variables et de la définition de la moyenne de Reynolds, de nouvelles équations pour les variables moyennes vont pouvoir être écrites.

L'approche statistique RANS (comme Reynolds Averaged Numerical Simulation) considère l'agitation turbulente comme un processus purement stochastique. Les variables moyennes sont donc statistiquement stationnaires mais peuvent quand même dépendre du temps par le biais des dérivées temporelles dans les équations moyennes. Cette dépendance au temps est susceptible de permettre la capture des mouvements cohérents à grande échelle, on parle alors de simulations URANS (Unsteady RANS). Cette dernière méthode ne permet tout de même pas de simuler le mélange des espèces induit par les effets locaux fortement instationnaires des flammes turbulentes [112]. On devra alors avoir recours à des méthodes complètement instationnaires comme les simulations à grandes échelles LES.

Dans les situations étudiées, il s'agit de reproduire numériquement le mélange turbulent non-réactif et réactif, des ergols liquides cryogéniques. C'est l'approche RANS avec *une description entièrement* Eulérienne des équations qui sera la plus appropriée à ce type de cas [113]. Le régime de combustion transitoire qui se manifeste par des fluctuations de pression de combustion ou de vitesses d'injections des ergols et se limitant à des situations bien connues d'instabilités lors de l'allumage ou de l'extinction du moteur, requiert une analyse fréquentielle et ne sera pas abordée dans cette thèse.

Dans les écoulements de gaz réactifs, la masse volumique est variable à cause du dégagement de chaleur induit par la flamme, le procédé de moyenne, appliqué à ces écoulements, conduit à des équations complexes très différentes des équations pour les écoulements à masse volumique constante. Afin de retrouver les mêmes formes d'équations, on introduit une moyenne pondérée par la masse

volumique appelée moyenne de Favre, définie comme :  $\overline{\rho g} = \bar{\rho} \tilde{g}$ . La fluctuation autour de la moyenne de Favre est notée :  $g = \tilde{g} + g''$ . A la différence de la moyenne de Reynolds, cette moyenne n'est pas centrée, donc  $\overline{g''} \neq 0$  mais  $\tilde{g}'' = 0$ .

Les équations de la mécanique des fluides (équations de Navier-Stokes) exprimant la conservation de la masse totale et de la quantité de mouvement s'écrivent (en formes conservatives) de la façon suivante :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k) = 0 \quad (3.1)$$

où  $\rho$  désigne la masse volumique du mélange et  $u_k$  est la  $k^{eme}$  composante du vecteur vitesse.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} (\tau_{ik}) - \frac{\partial p}{\partial x_k} \quad (3.2)$$

où  $\tau_{ik}$  est le tenseur des contraintes visqueuses :

$$\tau_{ik} = \rho \mu (\partial u_i / \partial x_k + \partial u_k / \partial x_i) - (2/3) \rho \mu \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \delta_{ik} \quad (3.3)$$

$\mu$  désigne la viscosité dynamique (moléculaire) du mélange.

Le bilan des espèces intervenant dans les réactions chimiques s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Y_i) = - \frac{\partial}{\partial x_k} (F_i^k) + \omega_i \quad (3.4)$$

où  $\omega_i = \rho \Omega_i$  est le taux de réaction chimique,  $Y_i$  est la fraction massique et  $F_i^k$  les flux de diffusion de l'espèce  $i$  dans le mélange. Ici, les flux de diffusion sont représentés par la loi de Fick soit :  $F_i^k = -\rho D_i \partial Y_i / \partial x_k$ , où  $D_i$  est le coefficient de diffusion (moléculaire) binaire de l'espèce  $i$ . Le bilan des espèces se réécrit comme :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k Y_i) = \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}) + \omega_i \quad (3.5)$$

Le bilan d'énergie conduit à l'équation pour l'enthalpie massique  $h$  du mélange dans le cas où le nombre de Mach de l'écoulement est faible :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\rho u_k h) = \frac{\partial}{\partial x_k} (\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\sum_i \rho D_i h_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}) + \frac{\partial p}{\partial t} \quad (3.6)$$

$\lambda$  est la conductivité thermique du mélange et  $h_i$  est l'enthalpie massique de l'espèce  $i$ , incluant dans sa définition, la chaleur de formation standard et l'enthalpie à l'injection :

$$h_i = \int_{T^{(0)}}^T C_{p_i}(T) dT + Q_i^F \quad (3.7)$$

L'enthalpie massique du mélange est calculée selon la relation :

$$h = \sum_i h_i(T) \cdot Y_i \quad (3.8)$$

Le comportement thermodynamique du mélange est dicté par une relation entre la masse volumique, la température et la pression, c'est l'équation d'état :

$$\rho = \rho(T, p) \quad (3.9)$$

La résolution de ces équations permet – à priori – de déterminer en tout point et à tout instant, la composition, la température et la pression du mélange quel que soit le type de flamme.

En appliquant l'opérateur de la moyenne de Favre aux équations de bilan, on obtient :

- l'équation de continuité

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \cdot \tilde{u}_k) = 0 \quad (3.10)$$

- l'équation de quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \cdot \tilde{u}_k) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \cdot \tilde{u}_k \cdot \tilde{u}_i) = \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\tau}_{ik} - \overline{\rho \cdot u_i'' \cdot u_k''}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_k} \quad (3.11)$$

- l'équation d'évolution de la fraction massique moyenne d'une espèce

$$\frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \cdot \tilde{Y}_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \cdot \tilde{u}_k \cdot \tilde{Y}_i) = \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho D_i \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}}) - \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho \cdot u_k'' \cdot Y_i''}) + \bar{\omega}_i \quad (3.12)$$

- l'équation de l'énergie pour l'enthalpie massique du mélange

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho} \cdot \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\bar{\rho} \cdot \tilde{u}_k \cdot \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_k}(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_k}) + \frac{\partial}{\partial x_k} \sum_i \overline{\rho D_i \frac{\partial h_i}{\partial x_k}} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_k}(\overline{\rho \cdot u_k'' \cdot h_i''}) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} \quad (3.13)$$

Ces équations moyennes sont semblables aux équations initiales sauf qu'elles contiennent les termes inconnus, pour le transport turbulent des variables, apparaissant sous forme de corrélations :

- $\overline{\rho \cdot u_i'' \cdot u_k''}$  est le flux turbulent de la quantité de mouvement (tenseur de Reynolds) ;
- $\overline{\rho \cdot u_k'' \cdot Y_i''}$  est le flux turbulent de la fraction massique de l'espèce  $i$  ;
- $\overline{\rho \cdot u_k'' \cdot h_i''}$  est le flux turbulent de l'enthalpie massique.

Pour pouvoir résoudre définitivement ces équations moyennes, il faudrait « connaître » ces flux turbulent. On peut, à partir des équations de base et du procédé de moyenne, écrire des équations de transport pour ces flux, ce qu'on appelle des modèles du second ordre. Mais ceci induit toujours de nouveaux termes d'ordre supérieurs, il faut du coup, s'arrêter à un certain ordre et modéliser les termes inconnus par des expressions ne faisant intervenir que des termes d'ordre inférieur ou du même ordre.

Alternativement, le modèle de turbulence, ou plus exactement le modèle pour la viscosité turbulente, permet d'explicitier des lois gradients, exprimant une proportionnalité entre ces termes de flux et les quantités moyennes (calculables) de l'écoulement.

Pour le cas d'un modèle de turbulence du premier ordre de type  $k-\varepsilon$  et qui repose sur l'hypothèse de Boussinesq, tous les termes de flux turbulents sont exprimés proportionnellement à la viscosité turbulente  $\mu_t$  et à leurs valeurs moyennes :

$$-\overline{\rho.u_i'' . u_k''} = \mu_t \left[ \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_k} + \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_i} - \frac{2\delta_{ik}}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right] \quad (3.14)$$

$$-\overline{\rho.u_k'' . Y_i''} = \frac{\mu_t}{Sc_t} \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k} \quad (3.15)$$

$$-\overline{\rho.u_k'' . h_i''} = \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial \tilde{h}_i}{\partial x_k} \quad (3.16)$$

Les nombres  $Sc_t, Pr_t$  sont respectivement les nombres de Schmidt et Prandtl turbulents caractérisant la diffusion d'espèces et de température.

En écrivant une équation de transport pour les composantes du tenseur de Reynolds et par définition d'une énergie cinétique de turbulence  $\tilde{\rho k} = (1/2) \overline{\rho.u_i'' . u_i''}$  et de son taux de dissipation  $\varepsilon = c_\mu k^2 / \mu_t$  où  $c_\mu = 0.09$  est une constante du modèle, on montre qu'en supplément des équations précédentes, on est amené à résoudre deux autres équations de transport pour  $\tilde{k}$  et  $\tilde{\varepsilon}$ , tel que :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} . \tilde{k}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{\rho} . \tilde{u}_i . \tilde{k}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_i} \right) + P_k + G_k - \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon} \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\tilde{\rho} . \tilde{\varepsilon}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{\rho} . \tilde{u}_i . \tilde{\varepsilon}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_i} \right) + \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \left[ c_{1\varepsilon} (P_k + G_k) - c_{2\varepsilon} \tilde{\rho} \tilde{\varepsilon} \right] \quad (3.18)$$

Les constantes du modèle de turbulence sont données comme suit :  
 $c_{1\varepsilon} = 1.44, c_{2\varepsilon} = 1.92, \sigma_k = 1.0, \sigma_\varepsilon = 1.3$

Le modèle  $k-\varepsilon$  à deux équations de transport a été développé initialement pour des jets plans, une expression 'dite de Pope' est ajoutée à l'équation de transport du taux de dissipation  $\varepsilon$  pour prendre en compte les effets du jet rond en sortie de l'injecteur coaxial. Le taux de production de l'énergie cinétique est ainsi corrigé par un terme invariant  $\chi$ , qui s'exprime en fonction des composantes des tenseurs  $S$ , comme [114] :

$$\tilde{\chi} = \tilde{\omega}_{ij} \tilde{\omega}_{jl} \tilde{S}_{li} \text{ avec } \tilde{\omega}_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \left[ \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} - \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right]; \tilde{\omega}_{jl} = \frac{1}{2} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \left[ \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_l} - \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_j} \right]; \tilde{S}_{li} = \frac{1}{2} \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \left[ \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_l} \right] \quad (3.19)$$

Ici,  $\chi$  désigne un invariant caractérisant l'étirement tourbillonnaire du jet, et  $C_{3\varepsilon}$  est une constante de Pope strictement positive. La correction se fait en choisissant une valeur appropriée pour la nouvelle constante de turbulence apparaissant en Eq. (3.18), comme :

$$C'_{2\varepsilon} = C_{2\varepsilon} - \chi C_{3\varepsilon} \quad (3.20)$$

La correction du terme du taux de production de l'énergie cinétique dans l'équation de transport  $\varepsilon$  permet de prendre en considération l'effet de l'étirement tourbillonnaire sur la viscosité du jet et par conséquent, sur son taux d'épanouissement. Ainsi, un jet rond modélisé comme axisymétrique, s'épanouit moins rapidement qu'un jet plan.

### 3.3. Modèle pour le taux de mélange d'ergols

Le mélange peut être caractérisé par la fraction de mélange  $f$ , vu un scalaire passif, qui par exemple, pour le couple  $H_2/O_2$ , s'exprime comme :

$$f = \frac{sY_{H_2} - Y_{O_2} + Y_{O_2}^0}{sY_{H_2}^0 + Y_{O_2}^0} \quad (3.21)$$

où  $s, Y_{O_2}, Y_{H_2}, Y_{O_2}^0, Y_{H_2}^0$  correspondent respectivement, au rapport stœchiométrique massique (pour une combustion complète,  $s = 8$ ), à la fraction massique de l'oxygène, à la fraction massique de l'hydrogène, à la fraction massique d'oxygène dans le jet de l'oxydant et à la fraction massique d'hydrogène dans le jet de combustible.

Au niveau de la couche de mélange, les réactifs sont complètement consommés et la flamme de diffusion se stabilise spatialement lorsque la fraction de mélange atteint sa valeur stœchiométrique  $f_{st} = 1 / (1+8) = 1/9$ .

En supposant des diffusivités égales ( $D_i = l \forall i$ ), les équations des espèces peuvent être réduites à une seule équation pour la fraction de mélange,  $f$ . Les termes de source de réaction dans les équations d'espèce s'annulent (puisque les éléments sont conservés dans les réactions chimiques), et donc  $f$  est une quantité passive. Bien que l'hypothèse de diffusivités égales soit problématique pour les écoulements laminaires, elle est généralement acceptable pour les écoulements turbulents où la convection turbulente emporte sur la diffusion moléculaire. L'équation de fraction de mélange moyenne au sens de Favre [115] :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{f}) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{f}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \tilde{f} \right) \quad (3.22)$$

Sachant que le mélange d'ergols peut se faire au niveau des petites échelles turbulentes (micro-mélange), on est amené en plus, à résoudre une équation pour le moment d'ordre 2, de la fraction de mélange moyenne, en l'occurrence pour sa variance  $\tilde{f}''^2$  :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{f}''^2) + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{f}''^2) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \tilde{f}''^2 \right) + C_g \mu_t (\nabla \tilde{f}''^2)^2 - C_d \bar{\rho} \frac{\tilde{\varepsilon}}{\bar{k}} \tilde{f}''^2 \quad (3.23)$$

où  $f'' = f - \tilde{f}$ . Les valeurs par défaut des constantes  $\sigma_t, C_g$  et  $C_d$  sont respectivement de 0,85, 2,86 et 2,0 [116].

### 3.4. Modèles thermodynamiques

La description physique d'un fluide peut être abordée à différentes échelles. L'approche habituelle en thermodynamique classique consiste à rassembler la complexité des phénomènes microscopiques qui régissent le système dans une relation algébrique entre les variables macroscopiques, appelée

équation d'état (EoS) du système. Dans cette section, la construction d'EoS théoriquement importante est présentée et liée aux phénomènes physiques pertinents qu'elles décrivent.

### 3.4.1. Modélisation d'un fluide parfait

Suite au besoin de modèles macroscopiques simples, motivés par l'utilisation intensive des machines à vapeur pendant la révolution industrielle, le modèle de gaz parfait a été établi au début du 19e siècle à partir d'observations empiriques, en combinant les lois de Gay-Lussac, Charles et Avogadro [117]. Il a été dit que, pour un gaz idéal, la pression  $P$ , le volume  $V$ , la température  $T$  et la quantité de substance  $n$ , sont liés par la relation :

$$PV = n.R.T \quad (3.24)$$

où  $R = 8,3144598 \text{ J}\cdot\text{mol}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$  est la constante universelle des gaz. Cette loi peut être écrite de manière équivalente sous la forme spécifique au volume :  $P(\rho, T, Y) = \rho\bar{r}T.$ , avec  $\bar{r} = R/\bar{M}$  et  $\bar{M}(Y) = \sum_{i=1}^n Y_i/M_i$  désignant respectivement, la constante massique du gaz, la masse molaire du mélange gazeux et  $M_i$  la masse molaire du  $i^{\text{ème}}$  composant.

### 3.4.2. Modélisation d'un fluide réel

Il existe trois principaux types d'équation d'état pour modéliser l'état d'un fluide supercritique : l'équation de Viriel, les équations cubiques et les équations de Benedict-Web-Rubin (BWR). Ces trois types d'équations convergentes toutes vers l'équation des gaz parfaits lorsque l'on tend vers les basses pressions [21]. Dans le cadre de cette étude, on recherche un type d'équation capable de représenter les comportements des phases supercritiques, pouvant être utilisée dans le cas d'un mélange et étant relativement simple d'utilisation. A titre d'exemple, l'équation de Viriel est une série polynomiale, explicite en pression, de la forme :

$$P = \frac{RT}{V} + \frac{RTB}{V^2} + \frac{RTC}{V^3} + \dots \dots \dots \quad (3.25)$$

Les coefficients B,C,... sont appelés les second, troisième,... coefficients du Viriel et ne sont fonction que de la température dans le cas d'un fluide pur. Cette équation est simple d'utilisation mais souffre de deux défauts majeurs : (a) elle ne peut être utilisée que pour la phase gazeuse d'un fluide, et (b) seulement dans le cas d'un faible écart au comportement d'un gaz parfait (la condition d'utilisation étant  $\rho_r < 0.5$ ) [23].

Les équations de type Benedict-Webb-Rubin sont les plus précises des équations d'état. Elles sont cependant fortement non linéaires et nécessitent la connaissance d'un nombre important de coefficients ( $A_0, B_0, C_0, a, b, c, \alpha, \gamma$  dans l'Eq. (3.25) qui dépendent eux même d'un nombre plus important de coefficients). Pour obtenir la masse volumique à partir d'une pression et d'une température données, il est nécessaire de passer par un processus itératif. Ces équations sont donc très coûteuses en temps de calcul [21]. Par contre, elles sont applicables sur de larges intervalles de pression et de température, et s'expriment comme :

$$P = \rho RT + \left( B_0 RT - A_0 + \frac{C_0}{T^2} \right) \rho^2 + (bRT - a) \rho^3 + \alpha \rho^6 + \frac{c \rho^3}{T^2} (1 + \gamma \rho^2) e^{-\gamma \rho^2} \quad (3.26)$$

En vertu de la complexité de ce type d'équations, elles n'ont pas fait l'objet d'utilisations courantes ; les équations d'états dites cubiques constitueront une alternative simple et efficace.

Le contexte relatif à l'exploitation des lois de comportement sous forme de bases de données thermodynamiques, s'est retourné vers les équations cubiques; qui s'avèrent "simples" à utiliser, précises et ne nécessitent pas de résolutions itératives.

Les équations dites "cubiques" sont des relations explicites en pression mais du troisième ordre en volume molaire, masse volumique, ou facteur de compressibilité. Leurs formes génériques sont de type :

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a\alpha(\omega, T)}{v^2 + ubv + wb^2} \quad (3.27)$$

ou

$$P = \frac{\rho RT}{M - \rho b} - \frac{\rho^2 a\alpha(\omega, T)}{M^2 + ubM\rho + wb^2\rho^2} \quad (3.28)$$

Une forme équivalente des équations (3.27) et (3.28) est :

$$Z^3 - (1 + B - uB)Z^2 + (A + wB^2 - uB - uB^2)Z - AB - wB^2 - wB^3 = 0 \quad (3.29)$$

où  $A = \frac{a\alpha P}{R^2 T^2}$ ,  $B = \frac{bP}{RT}$  et  $Z = \frac{PV}{RT}$ . Sur cette dernière équation, on voit clairement apparaître que l'équation est du troisième ordre en  $Z$ .

Les quatre principales équations cubiques usuelles, sont l'équation de Van Der Waals (VDW), de Redlich-Kwong (RK), de Soave-Redlich-Kwong (SRK) et de Peng-Robinson (PR) [23]. Les coefficients  $a$  et  $b$  permettent de prendre en compte les interactions intermoléculaires. Le coefficient  $a$  modélise les forces attractives qui peuvent exister entre les molécules d'un fluide et le coefficient,  $b$  les forces répulsives. Ce dernier est aussi appelé "co-volume" et peut être assimilé au volume qu'occupe une molécule du fluide considéré. Ces deux coefficients dépendent des conditions critiques et sont définis de telle sorte qu'au point critique, les contraintes suivantes sont respectées :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_{T_c} = 0 \quad (3.30)$$

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_{T_c} = 0 \quad (3.31)$$

Le coefficient  $\alpha(T, \omega)$  permet de prendre en compte la non-sphéricité des molécules composant le fluide étudié. Les trois EOS utilisées sont explicitées ci-dessous.

#### **Soave-Redlich et Kwong (SRK, 1972)**

L'équation de Soave, Redlich et Kwong est une des nombreuses modifications de l'équation originelle de Redlich et Kwong. Pour sa modification, Soave a privilégié la représentation des tensions de vapeur des corps purs plutôt que leur comportement volumétrique. Il visait comme application les équilibres entre phases. L'équation d'état SRK s'énonce comme [118] :

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{v^2 + vb} \quad (3.32)$$

La modification se situe au niveau de  $a(T)$  qui fait intervenir la température critique et le facteur acentrique  $\omega$ . C'est donc une EoS à trois paramètres :  $T_c$ ,  $P_c$  et  $\omega$ , avec :

$$a(T) = a_0 \alpha ; \quad \alpha = (1 + \gamma(1 - \sqrt{T/T_c}))^2 ; \quad \gamma = 0,480 + 1,574\omega - 0,176\omega^2$$

$$a_0 = 0,42747 R^2 T_c^2 / P_c ; \quad b = 0,08664 RT_c / P_c$$

où  $\gamma$  est une fonction du facteur acentrique. L'expression de la forme cubique de l'équation d'état SRK est la suivante :

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0 \quad (3.33)$$

$$\text{avec } A = \frac{a\alpha P}{R^2 T^2} = 0,42748 \frac{\alpha P_r}{T_r^2} \quad \text{et } B = \frac{bP}{RT} = 0,08664 \frac{P_r}{T_r}$$

L'équation d'état de Soave-Redlich et Kwong conduit à un écart systématique par excès pour le calcul des volumes molaires de la phase liquide. Les tensions de vapeur des hydrocarbures sont par contre assez bien représentées. Entre la température normale d'ébullition et le point critique, les écarts sont de l'ordre de 1 à 2% [119]. Les nombreuses modifications qui ont été proposées par la suite ont pour objectif essentiel d'améliorer la précision pour le calcul des équilibres entre phases. Citons par exemple, les travaux de Mathias et Copeman en 1983, qui ont proposé comme expression de la fonction  $a(T_r)$  [120]:

$$a(T_r) = \{1 + c_1(1 - T_r^{0.5}) + c_2(1 - T_r^{0.5})^2 + c_3(1 - T_r^{0.5})^3\}^2 \quad (3.34)$$

Les paramètres  $c_i$  sont spécifiques de la substance considérée et de l'équation d'état cubique.

#### **Peng-Robinson (PR, 1976)**

L'équation d'état proposée par Peng et Robinson est très similaire à celle de Soave (SRK), la modification apportée concerne le terme d'attraction, dont l'expression s'écrit comme [121]:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{v^2 + 2vb - b^2} \quad (3.35)$$

$$a(T) = a_0 \alpha ; \quad \alpha = (1 + \gamma(1 - \sqrt{T/T_c}))^2 ; \quad \gamma = 0,37464 + 1,54226\omega - 0,26992\omega^2$$

$$a_0 = 0,45724 R^2 T_c^2 / P_c ; \quad b = 0,07780 RT_c / P_c$$

L'expression de la forme cubique de l'équation d'état PR est la suivante :

$$Z^3 - (1 - B)Z^2 + (A - 3B^2 - 2B)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad (3.36)$$

$$\text{avec } A = \frac{a\alpha P}{R^2 T^2} = 0,45724 \frac{\alpha P_r}{T_r^2} \quad \text{et } B = \frac{bP}{RT} = 0,07780 \frac{P_r}{T_r}$$

L'équation de Peng-Robinson est plus fiable que l'équation SRK pour le calcul des volumes molaires liquides [119]. C'est cependant à propos des calculs d'équilibres liquide-vapeur de mélanges sous pression que les équations d'état de PR et SRK trouvent leur principale application et se révèlent, actuellement, irremplaçables.

#### **Aungier-Redlich et Kwong (ARK, 1995)**

Aungier en 1995, a apporté une modification, en ajoutant un paramètre  $c$  et un exposant  $n$  à la température réduite, qui serait fonction du facteur acentrique de l'espèce pure [122] :

$$P = \frac{RT}{v - b + c} - \frac{a(T)}{v^2 + vb} \quad (3.37)$$

$$a(T) = a_0(T/T_c)^{-n} \quad ; \quad n = 0,4986 + 1,1735\omega + 0,4754\omega^2$$

$$a_0 = 0,42747 R^2 T_c^2 / P_c \quad ; \quad b = 0,08664 RT_c / P_c \quad ; \quad c = \frac{RT_c}{P_c + a_0 / (V_c^2 + V_c b)} + b - V_c$$

où  $n$  est une fonction du facteur acentrique.

Ces équations sont simples à utiliser et relativement précises. Leurs plages d'utilisation sont cependant plus limitées que celles des équations de type BWR [123].

#### **Les propriétés pseudo - critiques des mélanges ( $V_{cm}$ , $T_{cm}$ , $P_{cm}$ )**

La méthode de Lee et Kesler [23] est la plus utilisée et disponible dans la littérature pour le calcul des propriétés pseudo - critiques des mélanges.

##### **a) Volume pseudo-critique du mélange**

Le volume molaire pseudo-critique d'un mélange est obtenu par pondération des volumes pseudo-critiques de chaque constituant

$$V_{cm} = \frac{1}{4} \sum (x_i V_{ci}) + \frac{3}{4} \sum (x_i V_{ci}^{2/3}) \sum (x_i V_{ci}^{1/3}) \quad (3.38)$$

avec :

$V_{cm}$  Volume molaire pseudo-critique du mélange [ $m^3/kmol$ ]

$V_{ci}$  Volume molaire critique du constituant  $i$  [ $m^3/kmol$ ]

$X_i$  fraction molaire du constituant  $i$

##### **b) Température pseudo-critique du mélange**

La température pseudo-critique d'un mélange est obtenue par pondération des températures et des volumes pseudo-critiques de chaque constituant :

$$T_{cm} = \frac{(S_1 + 3S_2S_3)}{4V_{cm}} \quad (3.39)$$

$$S_1 = \sum (x_i V_{ci} T_{ci}) \quad ; \quad S_2 = \sum (x_i V_{ci}^{2/3} T_{ci}^{1/2}) \quad ; \quad S_3 = \sum (x_i V_{ci}^{1/3} T_{ci}^{1/2})$$

avec

$V_{cm}$  volume molaire pseudo-critique du mélange [ $m^3/koml$ ]

$V_{ci}$  volume molaire critique du constituant  $i$  [ $m^3/kmol$ ]

$X_i$  fraction molaire du constituant  $i$

$T_{cm}$  Température pseudo-critique du mélange [K]

$T_{ci}$  Température critique de constituant  $i$  [K]

##### **c) Pression pseudo-critique du mélange**

La pression pseudo-critique est calculée en fonction des autres coordonnées

$$P_{cm} = \frac{Z_{cm} RT_{cm}}{V_{cm}} \quad (3.40)$$

avec  $P_{cm}$  Pression pseudo-critique du mélange [bar], et le facteur de compressibilité  $Z_{cm}$  critique du mélange est donner par :  $Z_{cm} = \sum x_i Z_i$ .

### Les règles de mélange

Pour un mélange constitué de  $n$  espèces, les paramètres  $a_0$  et  $b$  figurant dans les formulations des EoS peuvent être calculés par des règles de mélange quadratiques de type Van Der Walls. Une des règles utilisées couramment, est la pondération par la masse volumique (VWML comme Volume weighted mixing law), utilisant les fractions massiques locales, pour l'estimation de la masse volumique du mélange comme [124] :

$$\frac{1}{\rho_m(P, T)} = \sum_i \frac{Y_i}{\rho_i(P, T)} \quad ; \quad i = 1, 2 \quad (3.41)$$

où  $Y_i$  est la fraction massique de l'espèce pure  $i$ .

Dans le cas des équations cubiques, ces règles qui s'appliquent aux coefficients "a" et "b" sont les seuls paramètres qui tiennent compte de la nature du constituant. Ces règles sont principalement empiriques et il en existe plusieurs. Dans un cas de mélange binaire, les plus populaires sont celles proposées par Van Der Walls et conseillées par Clifford *et al.* [24] :

$$a_m = a_{11}X_1^2 + 2a_{12}X_1X_2 + a_{22}X_2^2 \quad (3.42)$$

$$b_m = b_1X_1 + b_2X_2 \quad (3.43)$$

avec

$$a_{12} = \sqrt{a_{11}a_{22}}$$

Ainsi que celles proposées par Hirschfelder *et al.* [18] :

$$a_m = a_{11}X_1^2 + 2a_{12}X_1X_2 + a_{22}X_2^2 \quad (3.44)$$

$$b_m = b_{11}X_1^2 + 2b_{12}X_1X_2 + b_{22}X_2^2 \quad (3.45)$$

avec

$$a_{12} = \sqrt{a_{11}a_{22}}$$

$$b_{12}^{1/3} = \frac{1}{2}(b_{11}^{1/3} + b_{22}^{1/3})$$

où  $a_{11}$ ,  $a_{22}$ ,  $b_{11}$ ,  $b_{22}$ ,  $b_1$  et  $b_2$  sont les paramètres de Van Der Walls pour les deux substances pures,  $a_m$  et  $b_m$  sont les nouveaux coefficients pour le mélange. Les termes  $a_{12}$  et  $b_{12}$  sont des termes croisés.  $X_1$  et  $X_2$  représentent la fraction molaire de l'espèce 1 et de l'espèce 2.

## 3.5. Modélisation dynamique et thermique de la phase liquide

### 3.5.1. Fragmentation et atomisation d'un jet liquide

L'atomisation est un phénomène transitoire qui fait passer un liquide d'un état continu à un état dispersé. Ce passage est une réorganisation du fluide vers un état stable dans lequel les perturbations extérieures à l'origine de l'atomisation ne génèrent plus d'instabilités amplifiées. L'origine physique de cette instabilité capillaire réside dans la minimisation de l'énergie de surface. En effet, pour un volume de fluide compact donné, la forme qui minimise la surface est la sphère et non le cylindre initialement imposé par le jet, d'où la transition du jet en gouttes. Cet argument énergétique est dû au physicien Belge « Plateau », qui le propose en 1873 [125]. En 1879, Lord Rayleigh affirme qu'il existe une longueur d'onde optimale  $\lambda_{opt} = 4.51D$  où  $D$  est le diamètre de l'injecteur qui, lorsqu'elle

correspond aux perturbations les plus rapidement amplifiées, conduit à la formation de gouttes dont le diamètre vaut  $1.89D$  [126].

En 1931, Weber définit un nombre caractéristique du phénomène  $We$  qui compare les forces aérodynamiques d'arrachement aux effets surfaciques. Ce nombre est souvent utilisé en modélisation pour définir une valeur seuil au-delà de laquelle l'atomisation se produit. L'atomisation peut être décrite de façon générique en trois phases :

- Des efforts extérieurs (interactions fluide-structure, trainée, acoustique,...) engendrent des instabilités dans un écoulement diphasique, même en régime laminaire,
- Ces instabilités sont amplifiées et la minimisation de l'énergie de surface engendre premières ruptures (d'une nappe en filaments puis en gouttelettes, ou d'un filament directement en gouttelettes, figure 3.2 partie gauche). Ce processus est appelé atomisation primaire,
- Les gouttelettes les plus volumineuses issues de l'atomisation primaire peuvent être instables si leur nombre de Weber ( $We$ ) est assez grand; on assiste ainsi à la création de nouvelles gouttes plus petites (figure 2.3 partie droite). Ce processus est appelé atomisation secondaire.

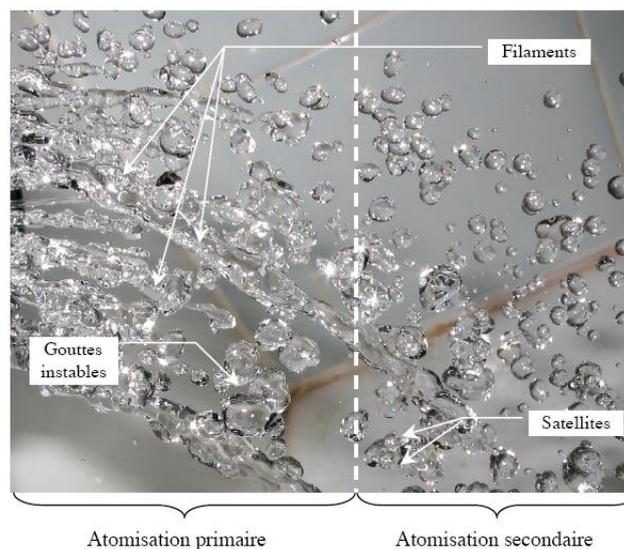


Figure 3.2 : Illustration de l'atomisation primaire et secondaire [127].

Les deux phénomènes de l'atomisation sont en fait, le résultat de la compétition entre différentes forces agissant sur le liquide. La force aérodynamique de cisaillement (due essentiellement à la vitesse relative entre les deux phases) a pour principal effet d'amplifier les instabilités créées au niveau de l'interface, alors que les forces de tension superficielle et de viscosité, ont pour effet de s'opposer à la déformation d'une part et de l'amortir d'autre part. Pour permettre d'évaluer l'importance relative de ces forces, les nombres de Weber ( $We$ ), de Reynolds ( $Re$ ) et d'Ohnesorge ( $Oh$ ) définis comme des rapports entre des forces, sont souvent utilisés [128,129] :

$$We = \frac{\text{force aérodynamique}}{\text{force de tension superficielle}} = \frac{\rho_g d (U_g - U_l)^2}{\sigma} \quad (3.46)$$

$$Re = \frac{\text{force aérodynamique}}{\text{force de viscosité du gaz}} = \frac{\rho_g d |U_g - U_l|}{\mu_g} \quad (3.47)$$

$$Oh = \frac{\text{force de viscosité du liquide}}{(\text{force aérodynamique} \cdot \text{force de tension de surface})^{1/2}} = \frac{\mu_l}{\sqrt{\rho_l d \sigma}} \quad (3.48)$$

De plus, le rapport de quantité de mouvement du jet liquide et du jet gazeux à l'injection, noté usuellement  $J$  ( $J = \rho_g U_g^2 / \rho_l U_l^2$ ) est d'une grande importance dans l'étude de l'atomisation, il contrôle la longueur de rupture des jets diphasiques coaxiaux lorsque les viscosités des fluides sont faibles [129].

Faeth [130] a montré que la fragmentation d'un jet liquide dans un environnement gazeux peut survenir selon différents modes et régimes dépendant essentiellement des nombres de Weber ( $We$ ) et Ohnesorge ( $Oh$ ) et qu'il était possible d'avoir des transitions entre ce régimes. Seul le régime d'atomisation (qui nous intéresse) survient à des nombres de Weber élevés et correspond aux cas où la force de cisaillement devient suffisante pour provoquer une fragmentation du jet dès la sortie de l'injecteur, donnant ainsi naissance à des gouttes aux diamètres variés. C'est le régime qui est utilisé dans la plupart des applications énergétiques car il conduit à la formation d'un brouillard dense, composé de gouttes de faibles diamètres, à même de se vaporiser rapidement.

### 3.5.2. Modélisation de l'atomisation primaire

De façon générale, il existe quatre mécanismes contribuant au processus d'atomisation primaire [131]. Ils sont schématisés sur la figure 3.3.

- Le premier mécanisme de désintégration, schéma (a) de la figure 3.3, est induit par la turbulence de l'écoulement interne, celle-ci étant générée dans la buse d'injection. Si la composante radiale de la turbulence interne du jet est assez forte pour contrer les forces de tension de surface, des structures turbulentes vont venir perturber la surface du jet. C'est un des mécanismes les plus importants.
- De fortes différences de vitesse entre le jet et le fluide ambiant vont induire des forces de cisaillement à l'interface, schéma (b) de la figure 3.3. A cause de la turbulence, la surface du jet est parcourue par un spectre de très petites ondes de surface. Certaines de ces ondes sont amplifiées par les forces de cisaillement. Elles deviennent alors instables et se séparent du jet pour former des gouttes. Les forces aérodynamiques peuvent expliquer les mécanismes en surface mais pas ceux de la structure interne du jet.
- La désintégration peut également être due à la relaxation du profil de vitesse, schéma (c) de la figure 3.3. Dans le cas d'un jet turbulent complètement développé (avec un ratio  $L/D$  grand, sans cavitation), le profil de vitesse peut changer au moment où il entre dans la chambre de combustion. Parce qu'il n'y a plus de contrainte liée aux parois, les forces de viscosité internes causent une accélération de l'extérieur du jet et le profil de vitesse devient constant. De cette accélération peut résulter des instabilités et causer la désintégration de la surface du jet.

- La dernière cause de désintégration est la cavitation, schéma (d) de la figure 3.3. Celle-ci est fortement présente pour des petits ratios  $L/D$  et pour de fortes pressions d'injection mais pas seulement. La cavitation se développe à l'intérieur de la buse du fait de la forte accélération et du fort cisaillement qui viennent induire des sauts de pression.

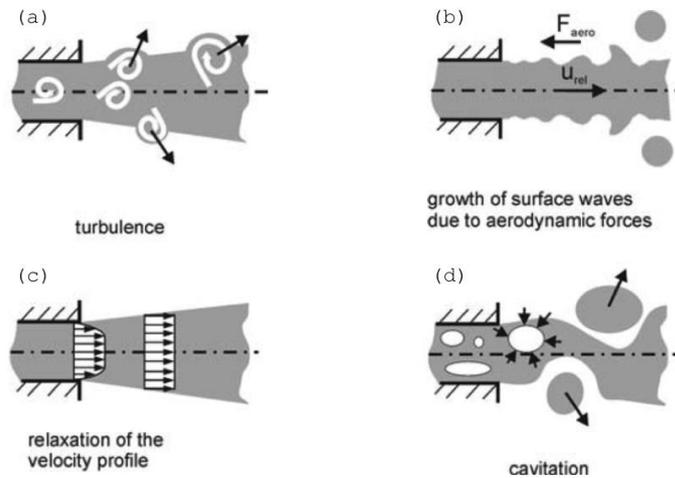


Figure 3.3 : Schématisation des mécanismes d'atomisation primaire [131].

Certains paramètres importants, ayant un effet sur la désintégration des jets, ont déjà été évoqués dans la description des mécanismes. L'injecteur joue ainsi un rôle prépondérant dans la forme du jet. Pour des études sur des géométries de jets telles que les nappes, les jets assistés, les jets asymétriques, ... le lecteur pourra se reporter au livre d'Omer et Ashgriz [132].

La géométrie de la buse peut avoir des effets importants sur l'injection [133]. Le ratio  $L/D$ , déjà évoqué, correspondant au rapport entre la longueur de buse et le diamètre de buse est déterminant dans la création de turbulence et du phénomène de cavitation, ainsi que sur le profil de vitesse. La pression à la laquelle le fluide est injecté influe notamment sur la longueur de rupture [134].

### 3.5.3. Modélisation de l'atomisation secondaire

Au cours du processus d'atomisation secondaire, les ligaments arrachés au jet liquide sont fractionnés pour former de fines gouttelettes et il s'avère jusqu'à présent, qu'il n'y a pas un modèle consistant pour décrire l'historique du jet avant la formation des gouttes (atomisation primaire) [135]. De ce fait, la plupart des modèles de l'atomisation secondaire reposent sur des observations et des mesures expérimentales de la cassure d'une seule goutte initialement sphérique [135]. En effet, la génération expérimentale de ligaments stables n'est pas aisée, ceux-ci ayant tendance à se contracter sous l'effet de la tension superficielle pour arriver à des formes plus sphériques. En fonction du rapport des intensités des forces de cisaillement et de tension de surface (donc de  $We$ ), une goutte initialement sphérique peut être seulement déformée ou fragmentée. La transition entre ces deux évolutions permet de définir un nombre de Weber critique  $We_c$ , qui nous renseignera sur le fait que, si une goutte placée dans des conditions expérimentales données, se fragmente. Les études consistant à la

détermination de ce nombre critique sont nombreuses et ont conduit à l'obtention d'une corrélation du nombre de Weber en fonction du nombre d'Ohnesorge, sous la forme [136] :

$$We_c = 12(1 + 1.077 Oh^{1.6}) \quad (3.49)$$

Comme l'ont montré Pilch et Erdman [136], cette corrélation reproduit bien (figure 3.4) les données expérimentales (de Brodkey en 1969) de diverses origines. Dans le cas des liquides à faible viscosité ( $Oh \leq 0.1$ ), le nombre de Weber critique est indépendant du nombre d'Ohnesorge et on retrouve alors  $We_c = 12$ , valeur souvent rencontrée dans la littérature et attribuée au nombre de Weber critique.

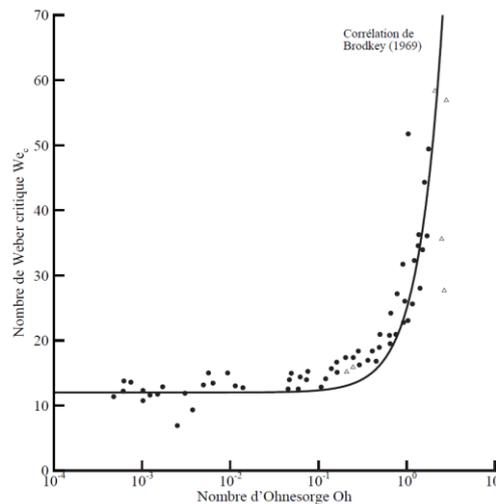


Figure 3.4 : Evolution du nombre de Weber critique [136].

Si les conditions expérimentales le permettent ( $We \geq We_c$ ), la goutte se fractionne. Cette cassure pouvant survenir sous différentes formes, en fonction des paramètres intrinsèques à la goutte (diamètre initial, viscosité du liquide, tension de surface,.....) et des propriétés du gaz environnant. De nombreuses études ont été menées sur la détermination de ces modes de cassure et on conduit à une classification globale en huit (08) modes de fragmentation, observés successivement au cours de l'accroissement de la force de cisaillement appliquée à la goutte.

Des détails sur le comportement de chaque mode ainsi que la transition d'un mode à l'autre en fonction du nombre de Weber et Ohnesorge, peuvent être trouvés dans le papier de Shraiber *et al.* [137].

On note également que l'effet de la pression de l'entourage de la goutte est important dans le sens où il peut mettre en évidence l'apparition précoce d'un mode plutôt qu'un autre. C'est ainsi que Gelfand décrit l'effet de la pression via un paramètre  $A$  défini comme [138] :

$$A(P) = 1.5 \left[ \frac{\rho_l}{\rho_g(P)} \right]^\alpha \left[ \frac{\mu_g}{\mu_l} \right]^\beta \quad (3.50)$$

où  $\alpha, \beta$  sont des constantes empiriques du modèle.

Le modèle stipule que le mode (N° 5 sur la figure 3.5) de cassure par épluchage (sheet stripping), où la goutte se casse par cisaillement en des ligaments sans formation de poches (figure 3.5) est le seul à être observé lors du comportement en pression à condition que le rapport  $We / \sqrt{Re} \succ A(P)$ .

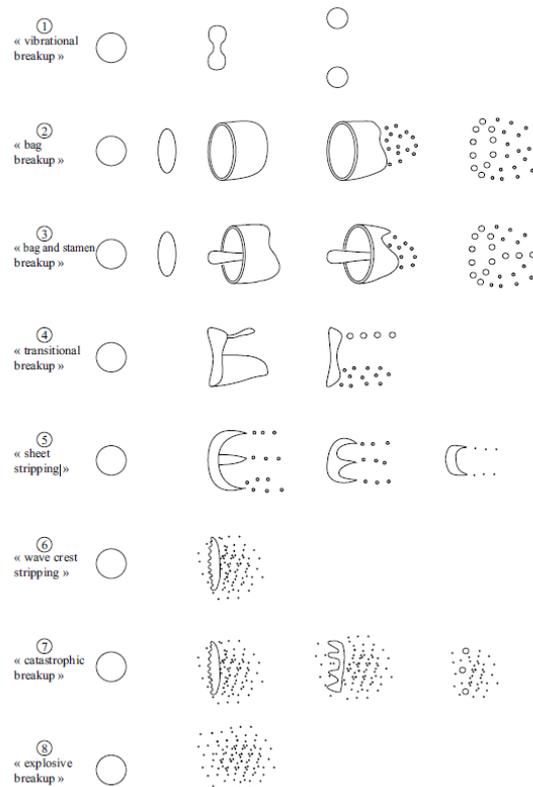


Figure 3.5 : Illustration des divers modes de cassure d'une goutte [138].

La dynamique de la cassure d'une goutte met en relief différents temps caractéristiques. Les plus largement étudiés sont le temps d'initiation de la cassure, défini comme le temps depuis l'injection du liquide jusqu'au début de la formation des ligaments (pour le mode sheet stripping), ainsi que le temps total de cassure, représentant la durée pendant laquelle la goutte et ses fragments sont soumis aux processus de cassure. Des corrélations pour le temps total de cassure ont été établies par Pilch et Erdman [136], et montrent que pour les liquides de faible viscosité (régimes où  $Oh < 0.1$ ), une expression simple permet de déterminer la valeur adimensionnée (par la quantité  $d_0 / u_{inj}$ ) du temps total de cassure :

$$\begin{aligned}
 t_{total-cassure} &= 6(We - 12)^{-0.25}, \text{ si } 12 \leq We \leq 18 \\
 t_{total-cassure} &= 2.45(We - 12)^{0.25}, \text{ si } 18 \leq We \leq 45 \\
 t_{total-cassure} &= 14.1(We - 12)^{-0.25}, \text{ si } 45 \leq We \leq 351 \\
 t_{total-cassure} &= 0.766(We - 12)^{0.25}, \text{ si } 351 \leq We \leq 2670 \\
 t_{total-cassure} &= 5.5, \text{ si } We \geq 2670
 \end{aligned} \tag{3.51}$$

### 3.5.4. Modélisation de la vaporisation

La combustion s'établissant entre les réactifs sous forme gazeuse, le brouillard issu du processus d'atomisation doit être vaporisé. Les modèles physiques utilisés sur les codes calcul sont en grande partie, basés sur un système simplifié, constitué d'une goutte isolée sphérique [128].

La physique est généralement décrite selon une approche à gazéification pure (aucune flamme n'entoure la goutte pendant que celle-ci se vaporise). La vaporisation d'une goutte froide (par rapport au gaz environnant) au repos est la conséquence de l'établissement du transfert massique et thermique entre le gaz et le liquide. Un transfert de chaleur par conduction s'établit du gaz chaud vers la surface froide de la goutte, cette chaleur transmise au liquide a pour effet, d'une part, d'augmenter sa température (ce processus n'est pas pris en compte dans l'établissement des lois standard de vaporisation), et d'autre part, de vaporiser le liquide à la surface de la goutte. La transformation d'une partie du liquide en vapeur génère un important gradient de concentration autour de la goutte, favorisant la diffusion de la vapeur dans le milieu gazeux environnant.

En s'évaporant, la goutte perd une quantité de matière au profit de son environnement, ce qui se traduit par une diminution de son diamètre (ou diamètre moyen dans le cas d'un nuage de gouttes) avec le temps. La dérivation de cette relation (appelée loi du  $d^2$ ) repose, en fait, sur plusieurs hypothèses simplificatrices, dont on ne citera que les plus pertinentes [139] :

- Le taux de changement de phase entre le liquide et sa vapeur est beaucoup plus élevée que le taux de transport dans la phase gazeuse, ce qui entraîne un équilibre liquide-vapeur permanent à la surface de la goutte;
- La pression est supposée constante dans le gaz autour de la goutte;
- Les propriétés de transport en phase gazeuse sont indépendantes de la pression et de la température. Le nombre de Lewis de la phase gazeuse est unitaire;
- Les phénomènes de transfert de chaleur et de masse, ainsi que les réactions chimiques dans la phase liquide sont négligés. Cela implique une absence de période de chauffage pour la goutte; La phase liquide aussi, est en état d'équilibre quasi-stationnaire;
- Les effets Duffour (flux de chaleur produit par un gradient massique) et Soret (diffusion massique due à un gradient thermique) sont négligés.

Bien que ces hypothèses ont été sévèrement contestées [138], la loi du  $d^2$  demeure d'une grande utilité théorique dans la validation des modèles diphasiques monodisperses [140] et fait toujours partie des lois utilisées dans les codes commerciaux de calcul (Fluent, CFX, Kiva, ....etc.). Pour dériver cette loi, on exprime la conservation de la masse vaporisée, la conservation entre l'enthalpie du gaz environnant et la quantité de chaleur gagnée (par conduction) par la phase liquide ainsi que l'équation de conservation de l'espèce liquide (goutte), les conditions aux limites (utilisées pour la résolution) à la surface de la goutte doivent traduire un état quasi-stationnaire. La variation temporelle du carré du diamètre de la goutte en fonction du temps peut être exprimée comme [141] :

$$d^2(t) = d_0^2 - K.t \quad (3.52)$$

Il apparait ici, un taux de vaporisation  $K$  qui va dépendre dans le cas d'un écoulement laminaire autour de la goutte, du nombre de Spalding  $B$  massique (qu'on suppose le même que le Spalding thermique). Une extrapolation de l'expression du temps de vaporisation (la limite  $d \rightarrow 0$ ) aux régimes turbulents a été donnée par Kuo [141] :

$$t_{vap} = \frac{\rho_l C p_g d_0^2}{4\lambda_g (2 + 0.55 Re^{1/2} Sc^{1/3}) Ln(1 + B)} \quad (3.53)$$

où

$$B = \frac{C p_g (T_\infty - T_s)}{L_{vap}} = Y_{f-s} / (1 - Y_{f-s}) \quad (3.54)$$

et  $Y_{f-s}, T_s, L_{vap}, T_\infty$  représentent respectivement, la fraction massique du liquide et la température à la surface de la goutte, la chaleur latente de vaporisation de la phase liquide ainsi que la température du gaz entourant la goutte. Cette expression est valable pour les deux régimes, laminaire et turbulent de la phase gazeuse.

Les hypothèses précédentes restreignent fortement le domaine de validité de la loi en  $d^2$ . En effet, de nombreux phénomènes ne sont pas pris en compte, comme, entre autres, le chauffage de la goutte, la variation des propriétés de transport, des effets de la convection et de la pression. Les propriétés de transport sont influencées par la température et la composition.

Les études de Law et Law [142] mettent en évidence la dépendance des propriétés de transport avec la concentration des espèces et proposent des formes linéaires pour la chaleur spécifique et la conductivité thermique. Les études expérimentales quant aux effets de la pression sur le taux de vaporisation convergent vers une loi de type  $p^n$  où «  $n$  » est compris entre 0.2 et 0.4 pour ce qui est du taux de vaporisation mais à pressions modérées (ne dépassant pas 2 Mpa).

Au-delà de ces valeurs, les techniques usuelles (gouttes suspendues) sont plus délicates à mettre en œuvre en raison de la diminution de la tension superficielle (difficulté d'accrocher la goutte), ce qui pousse à expérimenter en microgravité [143].

### 3.6. Modèles de combustion

Les modèles de combustion, dans le cas d'une flamme turbulente, doivent permettre de calculer la composition de l'écoulement réactif en tout point, ainsi que le terme source de l'équation de conservation de l'énergie lié au dégagement de chaleur provenant des réactions exothermiques du processus de combustion. L'approche consiste à résoudre une équation de conservation pour chaque fraction massique d'espèce, intervenant dans le schéma réactionnel choisi.

Dans l'équation de conservation de l'espèce  $i$ , équation (3.4), le terme source, représente la création ou la destruction nette de l'espèce par la réaction d'oxydation considérée. Le flux diffusif laminaire de la masse de l'espèce  $i$  est relié au gradient de la fraction massique par le coefficient de diffusion  $D_{i,m}$  moléculaire de l'espèce  $i$  dans le mélange. Un coefficient de diffusion turbulent est ajouté au

coefficient moléculaire pour relier le flux diffusif à la fraction de masse moyenne. Ce coefficient de diffusion turbulent est défini comme le rapport de la viscosité turbulente au nombre de Schmidt turbulent, soit  $\mu/Sct$ . Le terme source dépend quand à lui de la température et des concentrations de manière fortement non linéaire. Par conséquent, le calcul du terme source moyen à partir des valeurs moyennes de la température et des concentrations conduit à des erreurs aberrantes [144].

#### *Flammes turbulentes non prémélangées*

L'influence de la turbulence sur la chimie (et réciproquement) est contrôlée par les temps caractéristiques relatifs à ces deux phénomènes. Un temps caractéristique chimique  $\tau_c$ , est défini généralement en fonction de la vitesse et de l'épaisseur de flamme laminaire [145]:

$$\tau_c = \frac{\delta_L^0}{S_L^0} \quad (3.55)$$

Un temps turbulent caractéristique peut être défini comme le rapport entre une échelle de longueur de la turbulence et la fluctuation de vitesse associée. On obtient ainsi différents temps correspondant aux différentes échelles caractéristiques des tourbillons. Par exemple, suivant l'échelle de Kolmogorov  $\eta_K$  représentant la taille des plus petits tourbillons, il vient que [145]:

$$\tau_{t,\eta_K} = \frac{\eta_K}{u'_{\eta_K}} \quad (3.56)$$

Si l'on considère maintenant les plus grandes structures de l'écoulement décrit par l'échelle intégrale  $l_t$ , on trouve [145]:

$$\tau_{t,l_t} = \frac{l_t}{u'_t} \quad (3.57)$$

Les rapports entre ces différents temps définissent des nombres sans dimension permettant de caractériser les différents régimes de combustion turbulente. Le nombre de Damköhler est défini comme le rapport entre le temps lié à l'échelle intégrale de la turbulence et le temps chimique, alors que le nombre de Karlovitz est égal au rapport entre le temps chimique et le temps lié à l'échelle de Kolmogorov.

$$Da = \frac{\tau_{t,l_t}}{\tau_c} \quad (3.58)$$

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_{t,\eta_K}} \quad (3.59)$$

Le nombre de Reynolds turbulent  $Re_t = u'_t l_t / \nu$  peut alors être réécrit en fonction de ces deux nombres adimensionnels, comme [145]:

$$Re_t = Da^2 Ka^2 \quad (3.60)$$

De manière générale, pour les flammes de diffusion, il est possible d'identifier différents régimes de combustion distincts en comparant les échelles caractéristiques des flammes (longueur et temps) à celles de la turbulence. Lorsque l'on s'intéresse à de telles flammes, la définition formelle de ces échelles présente certaines difficultés. En effet, contrairement au cas prémélangé, le front de flamme

ne se propage pas ce qui rend impossible la définition d'une vitesse de propagation. De plus, l'épaisseur de la zone de réaction dépend fortement des conditions de l'écoulement. Ainsi, les échelles de la flamme non prémélangée sont souvent liées aux phénomènes diffusifs, notamment via le taux de dissipation scalaire  $\chi_{st}$  à la stœchiométrie. Un temps caractéristique peut, par exemple, être obtenu suivant [145]:

$$\tau_c = \frac{1}{\chi_{st}} \quad (3.61)$$

Si cela s'avère nécessaire, un temps chimique  $\tau_c$  peut être obtenu dans le cadre d'une chimie globale, à partir de développements asymptotiques des taux de réactions. Cuenot et Poinso [146] se basent sur des résultats de calculs DNS pour tracer un diagramme représentant les différents régimes de combustion non prémélangée pouvant être rencontrés en pratique. Une représentation simplifiée de ce diagramme, tracé en fonction du nombre de Dämkohler de la flamme et du Reynolds turbulent, est schématisée sur la figure 3.6. On y distingue quatre domaines séparés par trois courbes correspondant à des Damköhler diffusifs constants : la limite d'extinction est représentée par la droite  $Da = Da^{ext}$  et la limite du régime de flammelettes par la droite  $Da = Da^{LFA}$  (LFA pour "Laminar Flamelet Assumption").

- Le premier domaine correspond à des valeurs du nombre de Reynolds turbulent inférieures à 1. Dans cette zone, l'écoulement reste laminaire ; les flammes possèdent donc une structure laminaire,
- Le second domaine est défini par  $Re_t > 1$  et  $Da > Da^{LFA}$ . Dans cette zone, l'hypothèse de flammelettes laminaires est vérifiée. Ainsi, la zone de réaction de la flamme est considérée comme mince et le temps caractéristique de la chimie est négligeable devant les échelles de temps de la turbulence. On peut alors considérer la flamme turbulente comme étant constituée d'une collection de 'petites' flammes laminaires appelées « flammelettes ». Ceci confère localement à la flamme turbulente les mêmes propriétés qu'une flamme laminaire,
- La troisième zone est définie pour des nombres de Damköhler compris entre  $Da^{LFA}$  et  $Da^{ext}$ . Les temps caractéristiques de la chimie ne sont plus négligeables devant les temps de la turbulence. Des effets liés à l'instationnarité de l'écoulement peuvent alors apparaître, modifiant le comportement de la flamme. L'hypothèse de flammelettes n'est donc plus valide,
- Dans la dernière région, délimitée par  $Da < Da^{ext}$ , des extinctions locales ('quenching') peuvent être observées le long de la flamme. Lorsque le nombre de Damköhler est encore augmenté, c'est toute la flamme qui s'éteint. De fortes instabilités de combustion peuvent être observées dans ce régime.

Ce diagramme permet de se représenter les différents régimes rencontrés en combustion turbulente non-prémélangée. Cependant, de telles flammes sont très dépendantes des conditions de l'écoulement externe (richesse, débit, pression...) et le diagramme présenté ne permet pas de définir de manière quantitative les différents régimes rencontrés. En particulier les bornes de ceux-ci sont susceptibles de varier fortement suivant le point de fonctionnement étudié.

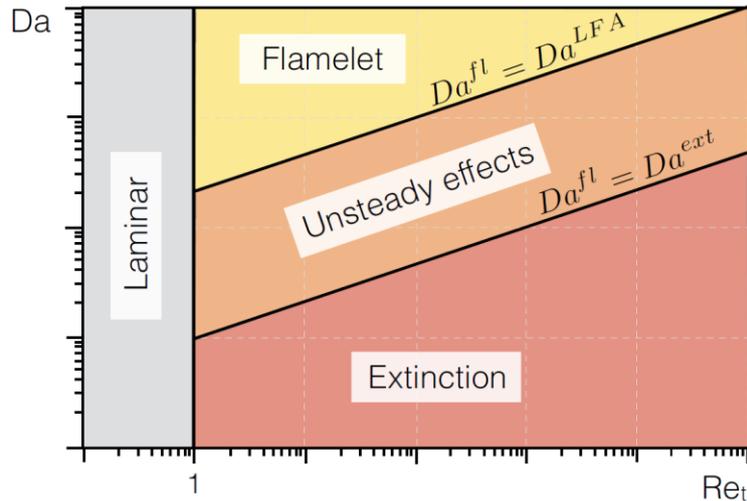
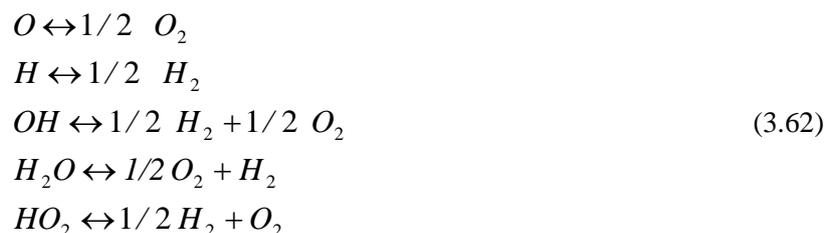


Figure 3.6 : Représentation schématique des différents régimes de combustion turbulente non prémélangée [145].

### 3.6.1. Le couplage chimie-turbulence

La modélisation du terme taux de réaction de l'espèce chimique constitue le fond du couplage qui existe entre la chimie et la turbulence; deux phénomènes en permanente compétitivité dans la combustion turbulente. Le nombre, le type des espèces produites ainsi que le mécanisme réactionnel qui sont considérés lors de la combustion ont une influence considérable (par le dégagement / absorption de la chaleur) sur la flamme et son environnement. Dans un mécanisme réactionnel, toutes les réactions possibles avec tous les corps possibles formés avec les éléments du mélange initial peuvent en principe se produire, mais l'expérience montre que certaines réactions ont des taux plus forts que d'autres, dans des conditions de pression et de température données, de sorte qu'on peut bâtir des schémas réactionnels simples. Cette simplicité n'est que relative, car les réactions élémentaires (dont on connaît les constantes et les ordres) les plus rapides ne sont pas les mêmes dans des conditions de pression et de température outre que celle de leur domaine d'établissement [112]. Arrivées à une situation stationnaire, les réactions chimiques se déroulent dans deux sens (directe et inverse), la composition est fonction uniquement des variables thermochimiques (pression, température et fraction de mélange  $f$  pour une flamme de diffusion) et ne dépend plus de la cinétique chimique (des vitesses des réactions). En cette situation d'équilibre chimique, les réactions prépondérantes sont toutes réversibles. Par exemple, pour le couple  $H_2/O_2$ , on a [112] :



Les radicaux libres (OH, H, O, HO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> parfois) sont issus de la dissociation des molécules saturées et sont donc produits à hautes pression et température. Les analyses paramétriques effectuées

par utilisation du code CEA [147], ont montré que l'hydroxyle OH était prépondérant par rapport aux autres radicaux dans les considérations de pression et de température du point A60 du montage Mascotte [101]

Il a été aussi vérifié que pour des considérations de haute pression (au-delà de 3 bars), les réactions élémentaires du schéma détaillé de la combustion de l'hydrogène dans l'oxygène [148] tendent à être plus rapides, en conséquence, même en supposant que la cinétique chimique peut être réduite à une seule réaction globale ( $H_2 + (1/2)O_2 = H_2O$ ), le temps chimique  $\tau_{chim}$  est infiniment petit et le nombre de Damkohler de l'écoulement (rapport du temps turbulent au temps chimique) est très grand [102].

La chimie est qualifiée d'infiniment rapide et l'approximation de Burke-Schumann représente la limite asymptotique pour laquelle le taux de réaction  $\bar{\omega}_i$  peut être de forme indéterminée sur la surface de la flamme (où  $Y_f = Y_{Ox} = 0$ ). En conséquences, les fractions massiques dans les équations de bilan d'espèces, doivent être remplacées par leurs valeurs à l'équilibre ( $Y_i = Y_i^{eq}(T, P, \xi)$ ) [128].

#### A. Modélisation du taux de réaction pour une chimie laminaire

Il est raisonnable et judicieux aussi, d'utiliser cette modélisation si les calculs des échelles caractéristiques de la turbulence, conduisent à positionner le point de fonctionnement dans la plage du  $Re_t < 1$  (figure 3.6). Le modèle de chimie laminaire, calcule les termes sources chimiques à l'aide d'expressions d'Arrhenius et ignore les effets des structures turbulentes sur le taux de réaction; il y'a donc un découplage entre la thermochimie et la dynamique de l'écoulement. Le modèle est exact pour les flammes laminaires, mais est généralement imprécis pour les flammes turbulentes en raison de la cinétique chimique d'Arrhenius, hautement non linéaire.

La précision du modèle laminaire peut cependant être acceptable et tolérable, pour la combustion avec une chimie relativement lente ( $\tau_c$  grand) et de petites fluctuations turbulentes ( $\tau_t$  petit), tel que c'est le cas pour les flammes supersoniques [149].

Le taux de réaction net, d'espèces chimiques  $i$  due à la réaction  $r$ , est calculé comme la somme des taux de réaction d'Arrhenius sur les réactions  $N_r$  auxquelles l'espèce participe :

$$\omega_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_r} \hat{\omega}_{i,r} \quad (3.63)$$

où  $M_{w,i}$  est la masse moléculaire des espèces  $i$  et  $\hat{\omega}_{i,r}$  est le taux de production/ de destruction molaire, de l'espèce  $i$  dans la réaction  $r$ . La réaction peut se produire dans la phase continue entre les espèces en phase continue uniquement. Considérez la  $r^{ème}$  réaction écrite sous forme générale comme:

$$\sum_{i=1}^N v'_{i,r} \omega_i \xrightleftharpoons[k_{b,r}]{k_{f,r}} \sum_{i=1}^N v''_{i,r} \omega_i \quad (3.64)$$

avec :

$N$  = nombre d'espèces chimiques dans le système

$v'_{i,r}$  = coefficient stœchiométrique pour le réactif  $i$  dans la réaction  $r$

$v''_{i,r}$  = coefficient stœchiométrique pour le produit  $i$  dans la réaction  $r$

$i$  = symbole désignant l'espèce  $i$

$k_{f,r}$  = constante de vitesse inverse pour la réaction  $r$

$k_{b,r}$  = constante de vitesse inverse pour la réaction  $r$

L'équation 3.64 est valable pour les réactions réversibles et non réversibles. Pour les réactions non réversibles, la constante de vitesse inverse  $k_{b,r}$  est à négliger.

Les sommations de l'équation 3.64 s'appliquent à toutes les espèces chimiques du système, mais seules les espèces qui apparaissent comme réactifs ou produits auront des coefficients stœchiométriques non nuls. Par conséquent, les espèces qui ne sont pas impliquées abandonneront l'équation.

Le taux molaire de création / destruction d'espèces  $i$  dans la réaction  $r$  ( $\hat{R}_{i,r}$  dans l'équation 3.63) est donné par :

$$\hat{R}_{i,r} = \Gamma(v''_{i,r} - v'_{i,r}) \left[ k_{f,r} \prod_{j=1}^{N_r} [C_{j,r}]^{\eta'_{j,r}} - k_{b,r} \prod_{j=1}^{N_r} [C_{j,r}]^{\eta''_{j,r}} \right] \quad (3.65)$$

où

$N_r$  = nombre d'espèces chimiques en réaction  $r$ ,

$C_{j,r}$  = fraction molaire de chaque réactif et espèce de produit  $j$  dans la réaction  $r$  (kgmol / m<sup>3</sup>),

$\eta'_{j,r}$  = exposant du taux direct pour chaque réactif et produit espèce  $j$  en réaction  $r$ ,

$\eta''_{j,r}$  = exposant de la vitesse inverse pour chaque réactif et espèce de produit  $j$  dans la réaction  $r$ .

$\Gamma$  représente l'effet net des tiers corps sur la vitesse de réaction. Ce terme est donné par [115] :

$$\Gamma = \sum_j^{N_r} \gamma_{j,r} C_j \quad (3.66)$$

où  $\gamma_{j,r}$  est l'efficacité du troisième corps de la  $j^e$  espèce dans la  $r^{\text{ème}}$  réaction.

La constante de vitesse directe pour la réaction  $r$ ,  $k_{f,r}$ , est calculée en utilisant l'expression d'Arrhenius [115] :

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT} \quad (3.67)$$

où

$A_r$  = facteur pré-exponentiel (unités cohérentes)

$\beta_r$  = exposant de température (sans dimension)

$E_r$  = énergie d'activation pour la  $r^{\text{ème}}$  réaction (J / kgmol)

$R$  = constante universelle des gaz (J / kgmol-K)

Si on affine à un mécanisme réactionnel contenant une ou plusieurs réactions réversibles, la constante de vitesse inverse pour la  $r^{ème}$  réaction  $k_{b,r}$ , est calculée à partir de la constante de vitesse directe en utilisant la relation suivante [115] :

$$k_{b,r} = \frac{k_{f,r}}{K_r} \quad (3.68)$$

où  $K_r$  est la constante d'équilibre pour la  $r^{e}$  réaction, calculée à partir de

$$k_r = \exp\left(\frac{\Delta S_r^0}{R} - \frac{\Delta H_r^0}{RT}\right) \left(\frac{p_{atm}}{RT}\right)^{\sum_{r=1}^{NR} (v_{j,r}'' - v_{j,r}')} \quad (3.69)$$

où  $p_{atm}$  désigne la pression atmosphérique (101325 Pa). Le terme dans la fonction exponentielle représente le changement de l'énergie libre de Gibbs et ses fonctions composantes, sont calculées comme suit [115] :

$$\frac{\Delta S_r^0}{R} = \sum_{i=1}^N (v_{i,r}'' - v_{i,r}') \frac{S_i^0}{R} \quad (3.70)$$

$$\frac{\Delta H_r^0}{RT} = \sum_{i=1}^N (v_{i,r}'' - v_{i,r}') \frac{h_i^0}{R} \quad (3.71)$$

où  $S_i^0$  et  $h_i^0$  sont l'entropie et l'enthalpie de formation à l'état standard (chaleur de formation).

Pour ce modèle, la seule contribution de la turbulence, vient du fait que la température utilisée dans l'évaluation des constantes d'Arrhenius (relation 3.67), est une moyenne au sens de Favre  $\tilde{T}$  déduite via la résolution de l'équation moyennée de l'énergie (équation 3.13).

### **B. Modélisation du taux de réaction pour une chimie tabulée avec équilibre**

Il est bien connu que sous les hypothèses de Shvab-Zeldovitch, il est possible de combiner les fractions massiques du combustible ( $Y_F$ ), de l'oxydant ( $Y_{ox}$ ) et des produits ( $Y_P$ ) dans l'écoulement, pour former la fraction de mélange  $f$  [150], considérée comme un scalaire passif (équation. 3.22):

- Zone pauvre (Si  $0 < f < f_{st} < 1$ )

$$\begin{aligned} Y_F(f) &= 0 \\ Y_{ox}(f) &= Y_{ox}^0 \left(1 - \frac{f}{f_{st}}\right) \\ Y_P(f) &= 1 - Y_{ox}(f) \end{aligned} \quad (3.72)$$

- Zone riche (Si  $0 < f_{st} < f < 1$ )

$$\begin{aligned} Y_F(f) &= Y_F^0 \frac{f - f_{st}}{1 - f_{st}} \\ Y_{ox}(f) &= 0 \\ Y_P(f) &= 1 - Y_F(f) \end{aligned} \quad (3.73)$$

avec  $Y_F^0$  correspond à la fraction massique du combustible dans le jet du combustible et  $Y_{ox}^0$  à la fraction massique de l'oxydant dans le jet d'oxydant.

L'état du mélange correspond à la zone de l'oxydant lorsque  $f = 0$ , et la zone de combustible lorsque  $f = 1$ ; la zone réactionnelle (flamme) correspond évidemment à la zone où  $0 < f < 1$ . La chimie est

par conséquence, bien décrite via la fraction du mélange, pour laquelle on résoudre une seule équation de type advection-diffusion, sans terme source.

Pour une seule fraction de mélange, les valeurs instantanées des fractions massiques, de la masse volumique du mélange et de la température, dépendent uniquement de la fraction de mélange instantanée,  $f$ :

$$\Phi_i = \Phi_i(h, f) \quad (3.74)$$

Dans l'équation 3.73,  $h$  représente l'enthalpie sensible du mélange (équation 3.8), qui dans le cas non adiabatique (température oxydant différente de la température du combustible), obéit à une équation de type :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} h) = \nabla \cdot \left( \frac{k_t}{c_p} \nabla h \right) + S_h \quad (3.75)$$

où  $S_h$  représente les termes source liés au rayonnement et à l'échange thermique avec la phase dispersée.

Dans le cas de la chimie tabulée, on ne résout pas classiquement une équation de l'énergie (de type 3.74), on calcule plus tôt, une enthalpie sensible  $h_i$  pour chaque valeur de la fraction de mélange  $f_i$ , allant de zéro (coté oxydant) à un (coté combustible) ; le mécanisme chimique (enthalpies de formation, type de réactions considérées, nombre de produits de combustion) étant choisi au préalable.

L'évaluation des moyennes (au sens de Favre) pour les variables thermochimiques de l'écoulement turbulent  $\tilde{\Phi}_i$ , passe par l'utilisation d'une fonction densité de probabilité (Pdf) de Favre  $\tilde{P}(f)$ , qui dans cette approche, est présumée.

Les moyennes des fractions massiques et de la température (ou d'enthalpie dans le cas non adiabatique), peuvent être calculées selon:

$$\tilde{\Phi}_i = \int_0^1 \tilde{P}(f) \Phi_i(f, h) df \quad (3.76)$$

De même, la masse volumique moyenne du fluide,  $\bar{\rho}$ , s'évalue comme

$$\frac{1}{\bar{\rho}} = \int_0^1 \frac{\tilde{P}(f)}{\rho(f)} df \quad (3.77)$$

où  $\rho(f)$  est la masse volumique (tabulée) obtenue en utilisant la loi des gaz parfaits.

En utilisant les équations 3.75 et 3.76, il ne reste plus qu'à spécifier la forme de la Pdf  $p(f)$  afin de déterminer l'état thermochimique moyen, en tous points du champ de l'écoulement turbulent.

La forme la plus usuelle de la Pdf présumée est la fonction Beta (figure 3.7).

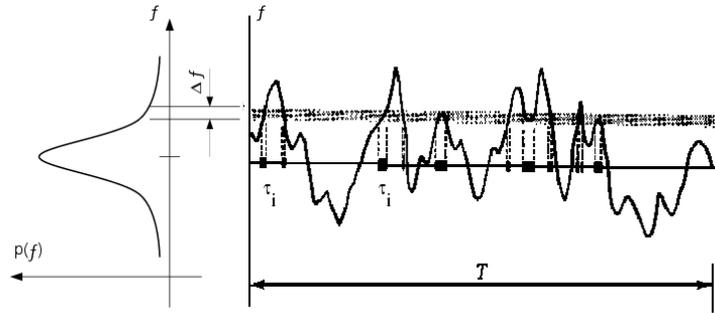


Figure 3.7 : Allure générale d'une fonction spéciale de type Beta (avec ses paramètres)

Cette forme pour la fonction Pdf, semble représenter le plus fidèlement les données mesurées expérimentalement [150]. Les paramètres de cette forme, dépendent uniquement de la moyenne de la fraction du mélange  $\tilde{f}$  et de sa variance,  $\tilde{f}''^2$ .

$$\rho(f) = \frac{f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}}{\int f^{\alpha-1}(1-f)^{\beta-1}df} \quad (3.78)$$

avec :

$$\alpha = \tilde{f} \left[ \frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{\tilde{f}''^2} - 1 \right] \quad (3.79)$$

et

$$\beta = (1-\tilde{f}) \left[ \frac{\tilde{f}(1-\tilde{f})}{\tilde{f}''^2} - 1 \right] \quad (3.80)$$

Ainsi, la prédiction de  $\tilde{f}$  et  $\tilde{f}''^2$  à chaque point du champ de flux (équations 3.22 et 3.23), la forme PDF supposée peut être calculé et utilisé comme fonction de pondération, pour déterminer les valeurs moyennes des fractions massiques des espèces, de la masse volumique et de la température.

### C. Modélisation du taux de réaction pour une chimie tabulée en couplage « faible » avec la turbulence

Lorsque le temps chimique associé à la flamme de diffusion est peu inférieur (et pas très inférieur) au temps caractéristique de la turbulence ( $\tau_c < \tau_t$ ), la flamme est toujours considérée comme une collection de petites flammes laminares « flammelettes », ayant une zone réactionnelle pouvant inclure des effets cinétiques, étirée et ondulée par les structures turbulentes sans qu'elle soit épaissie [151].

Dans ce cas, la flamme turbulente est vue comme seulement de flammelettes laminares planes étirées, dans une configuration d'écoulement « à contre-courant » (figure 3.8), en négligeant les autres configurations d'écoulements, dans lesquels la flamme n'est jamais stable. Si l'on étudie séparément de telles flammelettes de diffusion diverses plus ou moins étirées, on arrive à obtenir des relations directes donnant les fractions massiques de toute espèce chimique  $i$  en fonction de la fraction de mélange  $f$  et du taux d'étirement  $a$  (l'inverse d'un temps), comme [152]:

$$Y_i = Y_i(f, a) \quad (3.81)$$

Ce sont ces relations qui peuvent prendre en compte toute la complexité de la chimie, et qui constituent la « bibliothèque ou la table » de flammelettes. Il suffit alors, pour calculer toutes les valeurs moyennes, d'écrire en chaque point :

$$\tilde{Y}_i = \int_0^1 \int_0^\infty Y_i(f, a) \tilde{P}_2(f, a) df da \quad (3.82)$$

Avec la condition :

$$\tilde{P}_2(f, a) = \tilde{P}(f) \tilde{P}_a(a) \quad (3.83)$$

C'est-à-dire l'indépendance statistique des fluctuations de  $f$  et  $a$ , en plus d'une forme particulière pour, qui est une donnée spécifique de la turbulence.

L'avantage d'une telle méthode est que l'on peut calculer les flammelettes séparément, et que sa lourdeur n'est pas associée à celle des calculs de la turbulence.

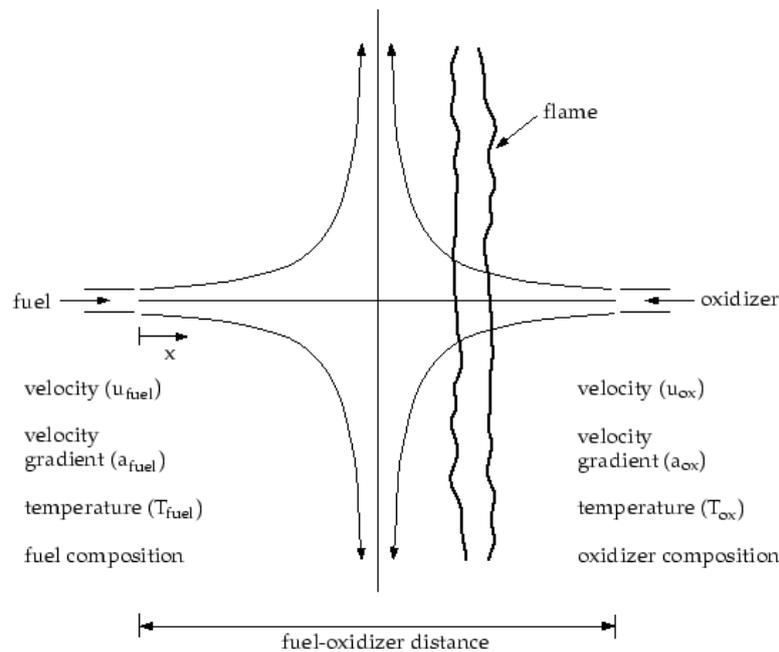


Figure 3.8 : Schématisation d'une flammelette de diffusion (à contre-courant) laminaire

Cette réduction de la chimie complexe à deux variables permet aux calculs de flammelette d'être prétraités et stockés dans des tables de recherche. En prétraitant la chimie, les coûts de calcul sont considérablement réduits.

Les équations d'équilibre, les méthodes de résolution et les calculs d'échantillons de la flamme de diffusion laminaire à contre-courant peuvent être trouvés dans plusieurs références. Des revues et analyses complètes sont présentées dans les travaux de Bray et Peters et Dixon-Lewis [151, 153].

Un taux de déformation caractéristique pour une flamme de diffusion à contre-courant peut être défini comme  $a_s = v/2d$  où  $v$  est la vitesse relative des jets de carburant et de comburant, et  $d$  est la distance entre les buses de jet.

Au lieu d'utiliser le taux de déformation pour quantifier l'écart par rapport à l'équilibre, il est préférable d'utiliser la dissipation scalaire, notée  $\chi$ . La dissipation scalaire est définie comme

$$\chi = 2D|\nabla f|^2 \quad (3.84)$$

où  $D$  est un coefficient de diffusion représentatif.

Notez que la dissipation scalaire,  $\chi$ , varie le long de l'axe de la flammelette. Pour la géométrie à contre-courant, le taux de déformation du flammelette  $a_s$  peut être lié à la dissipation scalaire à la position où  $f$  est stœchiométrique par [154]:

$$\chi_{st} = \frac{a_s \exp(-2[\text{erfc}^{-1}(2f_{st})]^2)}{\pi} \quad (3.85)$$

où

$\chi_{st}$  = dissipation scalaire à  $f = f_{st}$

$a_s$  = taux de déformation caractéristique

$f_{st}$  = fraction de mélange stœchiométrique

$\text{erfc}^{-1}$  = fonction d'erreur complémentaire inverse.

Physiquement, à mesure que la flamme est tendue, la largeur de la zone de réaction diminue et le gradient de  $f$  à la position stœchiométrique  $f = f_{st}$  augmente. La dissipation scalaire stœchiométrique instantanée,  $\chi_{st}$ , est utilisée comme paramètre essentiel de non-équilibre. Il a les dimensions  $s^{-1}$  et peut être interprété comme l'inverse d'un temps de diffusion caractéristique. Dans la limite  $\chi_{st} \rightarrow 0$ , la chimie a tendance à s'équilibrer et, à mesure que  $\chi_{st}$  augmente en raison des efforts aérodynamiques, le non-équilibre augmente. L'extinction locale du flammelette se produit lorsque  $\chi_{st}$  dépasse une valeur critique.

Une forme  $\beta$  pour la Pdf est considérée pour  $\tilde{P}(f)$  alors que les fluctuations de  $\chi_{st}$  sont réduites à un pic de Dirac, de sorte que la Pdf de  $\chi$  est une fonction Delta:  $\tilde{P}(\chi) = \delta(\chi - \bar{\chi})$ . Les équations de transport pour  $\tilde{f}$  et  $\tilde{f}^{\prime 2}$  sont résolues de la même manière que dans le cas de la Pdf présumée. Le moment d'ordre 1 pour la dissipation scalaire, à savoir  $\overline{\chi_{st}}$  est modélisé comme [115]:

$$\overline{\chi_{st}} = \frac{C_\chi \epsilon \tilde{f}^{\prime 2}}{k} \quad (3.86)$$

où  $C_\chi$  est une constante proche de la valeur 2.

Pour les flammelettes laminaires stables non adiabatiques, le paramètre supplémentaire d'enthalpie est requis. Cependant, le coût de calcul de la modélisation des flammelettes stables sur une gamme d'enthalpies est prohibitif, et par conséquent, certaines approximations sont introduites [150].

#### **D. Modélisation du taux de réaction pour une chimie découplée de la turbulence**

Le modèle de combustion EDM (comme Eddy Dissipation Model) est basé sur le même formalisme que celui du Eddy Break Up (EBU), développé dans les années 1970 par Spalding [155] pour le calcul des flammes prémélangées. Le concept Eddy-dissipation a été développé par Magnussen et Hjertager 1976 [60] pour étendre le principe du modèle EBU aux flammes non prémélangées. Celui-ci postule qu'on peut représenter le phénomène de combustion turbulente par des divisions successives (break-up), sous l'action du cisaillement turbulent, du domaine des gaz frais en élément de plus en plus petits (poches) et ce, jusqu'à atteindre une taille limite à laquelle ces bouffées, contenant les

réactifs supposés mélangés à l'échelle moléculaire, sont en contact suffisant avec les gaz brûlés pour que leur température soit assez élevée pour réagir instantanément. Dans le modèle de Magnussen et Hjertager, la chimie est considérée comme infiniment rapide que le mélange turbulent des réactifs, et la composition atteinte alors dans ces structures fines correspond à celle de l'équilibre chimique. Par conséquent, on peut supposer la vitesse de réaction moyenne comme inversement proportionnelle au temps caractéristique du mélange ( $\tilde{k}/\tilde{\varepsilon}$ ) des grandes échelles de la turbulence et indépendante de la cinétique chimique.

Le taux moyen net de la production/destruction de l'espèce  $i$  dans la réaction  $r$  peut donc s'exprimer par [115]:

$$\bar{\omega}_i = M_{\omega,i} \sum_{r=1}^{N_r} R_{i,r} \quad (3.87)$$

$$\dot{\omega}_{i,r} = v'_{i,r} M_{\omega,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min_{\mathcal{R}} \left( \frac{Y_{\mathcal{R}}}{v'_{\mathcal{R},r} M_{\omega,\mathcal{R}}} \right) \quad (3.88)$$

$$\dot{\omega}_{i,r} = v'_{i,r} M_{\omega,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_p}{\sum_j v''_{j,r} M_{\omega,j}} \quad (3.89)$$

où

$Y_P$  est la fraction massique de toute espèce de produit,  $P$

$Y_{\mathcal{R}}$  est la fraction massique d'un réactif particulier,  $\mathcal{R}$

$A$  est une constante empirique égale à 4,0

$B$  est une constante empirique égale à 0,5

Ceci est un artifice qui permet de simuler l'inflammation du mélange réactif sous l'effet du préchauffage par les produits de combustion, ainsi que cela se produit en pratique dans un équipement de combustion. L'absence de notion de cinétique dans ce modèle ne permet pas de tenir compte de l'effet de la température d'inflammation. On suppose donc que, si des produits de combustion existent ( $Y_P > 0$ ), c'est qu'on a atteint localement la température d'inflammation et donc la réaction peut ce produire. La conséquence de ceci est que, pour que la réaction de combustion puisse démarrer, il est obligatoire d'imposer une fraction non nulle de produit de combustion quelque part dans le domaine. Dès que la réaction a démarré, elle est supposée se maintenir tant que la turbulence soit présente ( $\tilde{k}/\tilde{\varepsilon} > 0$ ), et il est impossible de simuler les phénomènes d'extinction locale ou de décollement des flammes turbulentes.

### 3.7. Conclusion

Les modèles globaux pour l'étude de la combustion en régime supercritique ont été présentés selon les considérations qui sont actuellement les plus appropriées pour la haute pression. En premier lieu, le modèle dynamique avec les équations gouvernantes de transport, continuité, quantité de mouvement, énergie et conservation des espèces chimiques a été couplé à la moyenne pondérée de Favre. Le régime est turbulent et le modèle de turbulence (k- $\varepsilon$ ) a été sélectionné pour leur robustesse dans les

conditions difficiles. En deuxième lieu, les modèles thermodynamiques. En particulier, la famille des équations d'état cubiques (EoS) qui a été soigneusement étudiée, car elles fournissent un cadre pertinent pour les applications supercritiques. Pour le cas diphasique ou du mélange multicomposants, les règles de mélange ont été présentés. Ensuite, La modélisation dynamique et thermique de la phase liquide a été détaillée en atomisation primaire, secondaire et vaporisation d'un jet liquide. En dernier lieu, plusieurs modèles de combustion avec chimie laminaire, tabulée ou découplée de la turbulence ont été sélectionnés pour contrôler le taux de réaction.

# **Chapitre 04**

## **Etude de cas, Simulations et discussions**

## 4. Chapitre 04 : Etude de cas, Simulations et discussions

### 4.1. Introduction

Une bonne compréhension des différents phénomènes physiques et de la dynamique des écoulements qui existent lors de l'injection des jets de fluides cryogéniques est essentielle pour le développement de modèles et d'outils numériques nécessaires à la conception des systèmes d'injection pour moteurs fusées. Les processus d'injection et de mélange ont une influence majeure sur tous les autres processus qui peuvent avoir lieu, par la suite au sein de la chambre de combustion (combustion, turbulence, transferts thermiques, cinétique chimique,...). Ce chapitre est dédié aux écoulements ayant lieu au sein de moteurs fusées et reproduits à petites échelles à travers des expériences –*de la littérature*– sur des bancs d'essai. Ces simulations sont basées sur l'utilisation et l'application des modèles présentés au troisième chapitre concernant les différents processus thermodynamique, dynamiques et chimiques qui peuvent prendre lieu au sein des ensembles injecteurs-chambres de combustion, des montages pour moteurs cryotechniques.

### 4.2 Approche monophasique en gaz réel et calculs des nombres caractéristiques

Les rares données expérimentales en combustion cryotechnique publiées dans la littérature concernent seulement des cas effectués à échelle réduite sur des bancs d'essai (Annexe A). Ces essais ne sont apparemment effectués qu'en certaines conditions de vitesse d'injection, de température et de débit appelées points de fonctionnement. Sachant qu'une multitude de phénomènes couplés (atomisation, coalescence, fragmentations, vaporisation) prennent place, il n'est toujours pas possible de dériver un seul modèle pouvant prédire l'évolution de la phase liquide (continue ou dispersée) depuis l'injection jusqu'à la combustion. En l'occurrence, on s'appuie sur une quantification de quelques échelles et temps caractéristiques (comme c'est la coutume dans les écoulements turbulents monophasiques) relatifs à la dynamique de la phase liquide, pour montrer qu'un mode spécifique (fragmentation de dards, naissance de gouttes, épluchage des gouttes, ....) est dominant plutôt qu'un autre. Par un calcul approximatif de grandeurs, nous essayons de tabuler les différents nombres sans dimensions et temps caractéristiques pour une goutte d'azote ( $LN_2$ ) dans un environnement gazeux d'azote ( $GN_2$ ), ou de l'oxygène ( $LOx$ ) liquide injectée dans un courant d'hydrogène ( $GH_2$ ) sous des conditions identiques à celles des points RCM1-A du banc d'essai M51 et RCM3-A60 du Mascotte, respectivement [156]. Les relations que nous avons vues au chapitre 03 serviront à compléter les tableaux 4.1 et 4.2, où nous nous restreindrons aux cas extrêmes, du diamètre minimal (imposé par les limitations dues aux techniques de mesure) et diamètre maximal (que peuvent délivrer l'injecteur du banc d'essai) pour une goutte liquide.

En utilisant les différentes valeurs caractéristiques du fluide liquide  $LN_2$  ou  $LOx$  (masse volumique  $\rho$ , viscosité dynamique  $\mu$  et tension de surface  $\sigma$ ) aux conditions limites des cas de test RCM1-A et RCM3-A60 et suivant des diamètres minimal et maximal de goutte nous définirons les nombres adimensionnels  $Oh$ ,  $Re$ ,  $We$  et  $A(P)$ . Afin de définir le mode de cassure du jet, il faut vérifier la condition

$We / (Re)^{1/2} > \text{ou} < A(P)$ . Par la suite nous calculons le temps nécessaire à la formation d'une goutte liquide (à partir du dard) et le temps de vaporisation de cette goutte qui sera comparé au temps turbulent, ainsi la distance maximale qu'elle va parcourir avant que son diamètre s'annule. Suivant ces résultats on peut choisir quelle modèle (Eulérien ou Lagrangien) est le plus adapté à notre étude.

Dans le cas d'un jet dense à plusieurs (des milliers) gouttes, la connaissance des fonctions de distribution de la vitesse d'injection et du diamètre moyen sont importants pour l'évaluation des grandeurs adimensionnelles et des temps caractéristiques. A notre connaissance, il n'existe pas de moyens actuels pour déterminer expérimentalement ces distributions en régime supercritiques [67].

A pression supercritique de 3,97 MPa (cas du RCM1-A), la surface du jet LN<sub>2</sub> se transforme en une interface striée. La section transversale du jet augmente avec la distance en aval comme un jet gazeux. L'état du N<sub>2</sub> injecté passe d'un liquide à un fluide dense avec une pression croissante. Le mécanisme d'atomisation semble changer considérablement en l'absence de tension superficielle. Lorsque la pression ambiante augmente avec la présence de la tension superficielle, les échelles de la rupture (diamètres des ligaments et des gouttelettes) diminuent. À mesure que la tension superficielle chute encore au-dessous d'une certaine limite, le mécanisme d'atomisation se transforme en une instabilité de couche de cisaillement. [157]. La tension superficielle du jet LN<sub>2</sub> au point d'injection RCM1-A a une très faible valeur de l'ordre 10<sup>-4</sup>, NIST (National Institute of Standards and Technology) donne comme valeur  $\sigma_0 = 0,00054083 \text{ N/m}$  [158]. La tension de surface de l'oxygène liquide ne peut être identiquement nulle que lorsque la température en surface de la goutte atteint sa valeur critique, ceci n'étant pas évident à cause du mélange binaire avec l'hydrogène qui impose un point critique (en termes de température) bien inférieur à celui de la phase liquide pure. Néanmoins, les données expérimentales et les valeurs dans les simulations [55,61,67] utilisent une valeur faible  $\sigma_0 = 0,0144 \text{ N/m}$ .

Les calculs montrent que dans les conditions du point RCM1-A et RCM3-A60, le temps nécessaire à la formation d'une goutte liquide (à partir du dard) est quasiment proche du temps turbulent, ce qui constitue une valeur relativement énorme, étant donné que le temps turbulent (intégrale de turbulence) caractérise le retournement des grandes structures (écoulement moyen) qui ont les dimensions de la géométrie du domaine entier. En l'occurrence, si une partie du dard liquide peut être entraînée dans une telle structure, elle ne donnera naissance à des gouttes qu'après avoir parcourue une distance équivalente à la longueur totale du domaine. Cette situation est évidemment pas réelle étant donné pour le couple LOx/GH<sub>2</sub> que le dard et en raison de sa forte masse volumique et de son confinement par le jet gazeux (H<sub>2</sub>), ne peut en aucun cas se situer dans une zone de recirculation de coin. Cette valeur importante du temps de formation des gouttes confirme qu'il est difficile d'avoir un régime de gouttes (matérielles) dans ces conditions supercritiques. Néanmoins, si nous considérons qu'en certaines situations, des gouttes peuvent se former, elles ne seront que conséquences de la déstabilisation du jet liquide qui passe directement vers un régime d'atomisation ( $We / \sqrt{Re} > A(P)$ ) (tableau 4.1 :  $2,715 > 1,844$  ; tableau 4.2 :  $11,97 > 0,481$ ) sans passer par les régimes intermédiaires, ce qui donne naissance à des gouttes très

instables [138]. En cette situation, on peut calculer un ordre de grandeur du temps de vaporisation de ces gouttes (si elles existent) dans un régime turbulent qui paraît très faible (0,19 ms pour le cas du LN<sub>2</sub> et 0,47 ms pour LOx) devant le temps caractéristique de turbulence évalué via un calcul LES pour le cas du RCM3-A60 [159], et par une estimation du rapport  $k/\varepsilon$  pour le cas RCM-1 [156]. Ceci est révélateur de la faible durée de vie des gouttes dans un milieu turbulent en régime supercritique, en plus, si l'on suppose que la goutte (LN<sub>2</sub>, LOx) peut acquérir une certaine quantité de mouvement de la part de la phase gazeuse (injection coaxiale), la distance maximale qu'elle va parcourir avant que son diamètre s'annule ne dépassera pas quelques multiples du diamètre de l'injecteur ( $\approx 4D_{LOx}$  ;  $\approx 1.4D_{LN2}$ ) de l'oxygène liquide, ou de l'azote liquide respectivement (Oefelein [159] parle de  $5D_{LOX}$ ).

Tableau 4.1 : Nombres et temps caractéristiques de l'écoulement pour le cas RCM1-A.

Paramètres du cas : LN <sub>2</sub> /GN <sub>2</sub>	Diamètre de la goutte <b>22 <math>\mu m</math></b>	Diamètre de la goutte <b>44 <math>\mu m</math></b>	Remarques
<i>Oh</i>	0,0167	0,0118	Relation 3.48
<i>Re</i>	262,935	525,87	Relation 3.47
<i>We</i>	44,025	88,052	Relation 3.46
<i>A(P)</i> à 39,7 bars	1,844	1,844	Relation 3.50
$We / \sqrt{Re}$	<b>2,715</b>	<b>3,840</b>	-----
Régime d'instabilité de surface	<i>Le jet liquide passe directement en mode de cassure par cisaillement. La goutte s'épluche en petits fragments (gouttelettes) sans formation de ligaments</i>		
$t_{formation-goutte}$ <i>ms</i>	104,5	104,5	Formule utilisée en [138,159]
$t_{total-cassure}$ <i>ms</i>	0,026	0,043	Formule 3.51
$t_{vap-lamin aire}$ <i>ms</i>	1,02	4,09	Formule 3.53 avec $Re \rightarrow 0$
$t_{vap-turbulent}$ <i>ms</i>	0,19	0,58	Formule 3.53
$t_{turbulent}$ <i>ms</i>	2,96	2,96	$k / \varepsilon$
$X_{vap}$ mm	<b>1,07</b> (= 0,49 $D_{inj-LN2}$ )	<b>3,05</b> (= 1,39 $D_{inj-LN2}$ )	Distance parcourue avant vaporisation complète

Tableau 4.2 : Nombres et temps caractéristiques de l'écoulement pour le cas RCM3-A60.

Paramètres du cas : LO <sub>2</sub> /GH <sub>2</sub>	Diamètre de la goutte 50 $\mu m$	Diamètre de la goutte 100 $\mu m$	Remarques
$Oh$	0,042	0,03	Relation 3.48
$Re$	7361	14721	Relation 3.47
$We$	1027	2053	Relation 3.46
$A(P)$ à 60 bars	0,481	0,481	Relation 3.50
$We / \sqrt{Re}$	<b>11,97</b>	<b>16,92</b>	-----
Régime d'instabilité de surface	<i>Le jet liquide passe directement en mode de cassure par cisaillement. La goutte s'épluche en petits fragments (gouttelettes) sans formation de ligaments</i>		
$t_{formation-goutte}$ $ms$	101	101	Formule utilisée en [138,159]
$t_{total-cassure}$ $ms$	0,05	0,12	Formule 3.51
$t_{vap-lamin aire}$ $ms$	11,26	45,04	Formule 3.53 avec $Re \rightarrow 0$
$t_{vap-turbulent}$ $ms$	0,47	1,36	Formule 3.53
$t_{turbulent}$ $ms$	133	133	Calculs L.E.S [159]
$X_{vap} mm$	<b>6,82</b> (= 1,36 $D_{inj-LOx}$ )	<b>19,26</b> (= 3,85 $D_{inj-LOx}$ )	Distance parcourue avant vaporisation complète

En conséquence, nous retiendrons qu'en les conditions des points RCM1-A et RCM3-A60, il faudrait un temps important pour que le dard liquide se fragmente en gouttes, de plus, si la formation des gouttes aura lieu, celles-ci seront très instables et se vaporiseront en un temps très court et dans une zone réduite qui peut représenter ( $3,05/L_{chM51} = 0,003$  ;  $19,26/L_{chMascotte} = 0,04$ ) de l'étendue de la chambre de combustion des bancs M51 et Mascotte respectivement. Les calculs ci-dessus, sont évidemment basés sur des échelles moyennes (souvent à l'injection) propres aux phases liquides (LN<sub>2</sub>, LOx) dans un environnement gazeux, elles ne sont pas locales et ne peuvent donc pas prédire des situations « rares » dans lesquelles « quelques » gouttes peuvent se former, se trouver piégées dans des zones de

recirculation, sans autant se vaporiser, induisant entre autre, un « fragment » de phase liquide dispersée, échappant « bel et bien » à la description Eulérienne. C'est d'ailleurs ces situations exceptionnelles, qui induisent des inexactitudes dans la mesure de la masse volumique en sortie des injecteurs cryotechniques [55] et expliquent les écarts dans les prédictions numériques des masses volumiques des mélanges (sans combustion) près de la zone d'injection [102].

### 4.3. Analyse thermodynamique de la masse volumique

#### 4.3.1. Cas du nitrogène (N<sub>2</sub>) comme fluide pur

Pour rappeler que le point de fonctionnement du RCM1-A, se trouve dans des conditions quasi-critiques ( $Pr_{inj} = 1,17$ ,  $Tr_{inj} = 0,96$ ), il est présumé que de faibles écarts de température, puissent conduire à de forts gradients en masse volumique. En l'occurrence, l'ensemble des équations d'état (EoS) décrites dans la section 3.4.2, ont été reformulées en formes cubiques explicites  $\rho = \rho(P, T)$  en utilisant une routine Matlab [160].

##### *Soave-Redlich et Kwong (SRK, 1972)*

$$\rho^3(ab\alpha) + \rho^2(M(RTb - a\alpha + Pb^2)) + \rho(RTM^2) - PM^3 = 0 \quad (4.1)$$

##### *Peng-Robinson (PR, 1976)*

$$\rho^3(ab\alpha - RTb^2 - Pb^3) + \rho^2(M(2RTb - a\alpha + 3Pb^2)) + \rho(M^2(RT - Pb) - PM^3) = 0 \quad (4.2)$$

##### *Aungier-Redlich et Kwong (ARK, 1995)*

$$\rho^3(a(b - c) + \rho^2(M(RTb - a + Pb^2 - Pbc)) + \rho(M^2(RT - Pc) - PM^3) = 0 \quad (4.3)$$

où  $M$  est la masse molaire et  $a, b, c$  et  $\alpha$  sont des constants des EoS donner dans les section 3.4.2.

Pour une pression de chambre donnée, le calcul explicite (relation 4.1, 4.2, 4.3) se fait en variant la température dans la plage d'injection, avec des petits pas  $\Delta T = 0,5$  K, permettant de suivre au mieux les fortes pentes de la masse volumique, autour du point critique.

Dans la figure 4 la masse volumique est présentée en fonction de la température pour les EoS (PR, SRK, ARK), équation de gaz parfait et valeurs de NIST [158]. La température est varier dans l'intervalle [120-150] afin de capter le point d'injection du LN<sub>2</sub>  $T_{inj\_N2} = 120,9$  K, et la région du passage du N<sub>2</sub> de l'état trans-critique à l'état supercritique où une importante déviation est noté entre les EoS et l'équation de gaz parfait, au-delà de 150 K la différence est faible et négligeable entre les EoS eux même et les valeurs tabulées par NIST.

Le point de validation utilisé est celle des expériences de Branam et Mayer [42] avec la valeur de la masse volumique  $\rho^*$  mesuré à  $T = 126,9$  K. Un autre point est représenté correspond à l'équation d'état modifiée-PR qui a été dérivée par Muller *et al.* [94], en utilisant une modification de l'EoS de base de PR avec la simulation aux grandes échelles (LES) dans le but de prédire la masse volumique  $\rho^*$  mesurée par Branam *et al.* [42].

La figure 4.1a montre que l'équation de gaz parfait présente une sous-estimation importante de la masse volumique du N<sub>2</sub>, en particulier dans la plage [120-130 K]. L'écart relatif entre les équations d'état ARK / SRK et la prédiction du gaz parfait avoisine 74%, tandis que cet écart atteint 24% à  $T =$

150 K. Désormais, le fait de considérer le jet N<sub>2</sub> comme un gaz parfait peut ainsi conduire à des erreurs aberrantes sur les propriétés thermodynamiques, dans les régions « froides » de l'écoulement, mais aussi sur toute la dynamique de l'écoulement, notamment en régime turbulent (pondération par la masse volumique).

Muller *et al.* [94] ont réussi à retrouver la valeur de masse volumique  $\rho^* = 400 \text{ kg/m}^3$  mesurée par Branam et Mayer [42], mais à une température légèrement supérieure  $T = 128,5 \text{ K}$  (figure 4.1b).

Il est à noter que la masse volumique de N<sub>2</sub> reproduite via l'équation PR correspond assez bien à la courbe du NIST, avec une sous-estimation globale de 4,8% au-dessus de la température  $T = 126,9 \text{ K}$  (Fig. 4.1a). Dans la plage de température [120-126,9 K], la masse volumique d'azote calculée par les équations d'état ARK et SRK, semble légèrement inférieure aux valeurs tabulées par le NIST [158]. Néanmoins, la valeur de masse volumique expérimentale  $\rho^*$  telle qu'elle est mesurée à  $T = 126,9 \text{ K}$  est bien représentée, par utilisation des équations d'état SRK ou ARK (figure 4.1b). Au-delà de la valeur  $T = 130 \text{ K}$ , les équations PR, ARK et SRK reproduisent quasiment les mêmes valeurs de masse volumique de N<sub>2</sub>.

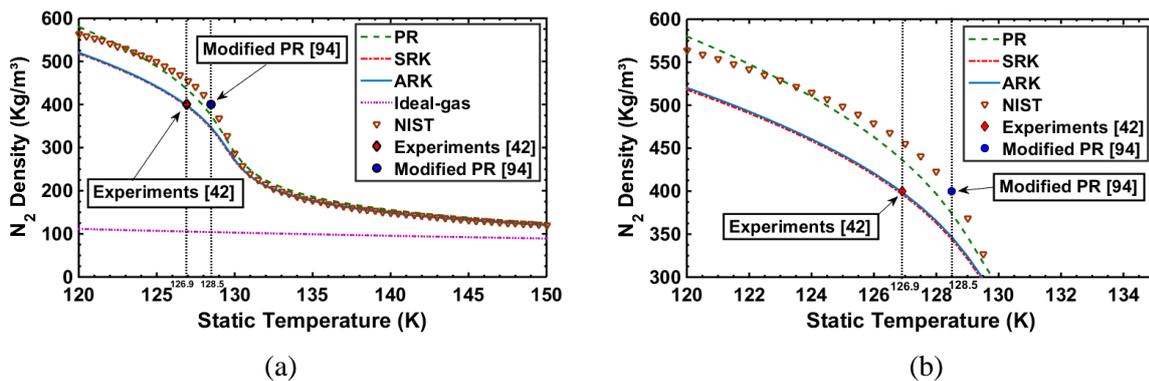


Figure 4.1 : (a) Masse volumique d'azote en fonction de la température statique ( $P = 3,97 \text{ MPa}$ ); (b) zoom sur la plage de température d'injection

En se référant aux mesures expérimentales de la masse volumique, effectuées de Branam *et al.* [42], il paraît judicieux de faire usage d'une EoS de type SRK (ou ARK) dans la simulation numérique de la dynamique du jet N<sub>2</sub>, lorsque l'injection se fait au-dessous de 130K.

### 4.3.2. Cas du couple cryogénique LOx/GH<sub>2</sub>

La même routine Matlab [160] est utilisée pour analyser le cas d'une injection O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> correspondant au point de fonctionnement RCM3-A60 du banc Mascotte [156]. La température minimale 85K représente celle de l'oxygène liquide à l'injection, tandis que 287K est celle du GH<sub>2</sub>.

A la température d'injection, le calcul de la masse volumique de l'oxygène, révèle une importante sous-estimation (-77%) lors de l'utilisation de l'équation d'état du gaz parfait et ce, par rapport aux mesures du RCM3-A60, tandis que de faibles surestimations, +0.27%, +2% et +13% sont notées au même point, lors de l'utilisation des EoS SRK, ARK et PR respectivement (figure 4.2).

Les équations SRK et ARK affichent une bonne prédiction de la masse volumique au point RCM3-A60, et affichent aussi un comportement quasi-similaire aux courbes du NIST, avec une erreur maximal de 6% sur l'intervalle de température [85 – 290 K].

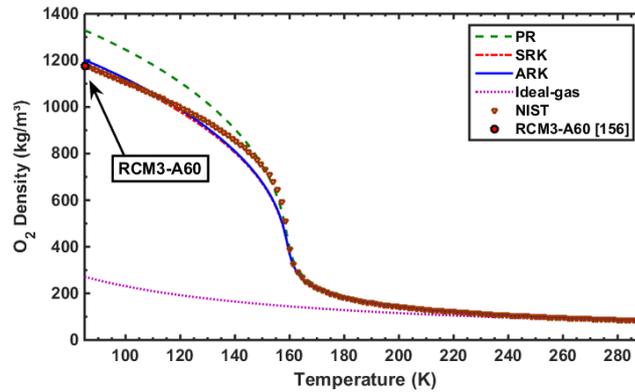


Figure 4.2 : Masse volumique de l’oxygène (O<sub>2</sub>) en fonction de la température statique (P = 6 MPa)

L’injection de l’hydrogène se faisant à  $Tr_{inj\_H_2} = 8,63$ , ce dernier est considéré comme un fluide supercritique. Les courbes du NIST sous-estiment la masse volumique au point d’injection avec un écart relatif proche de -10% (figure 4.3). Les équations SRK et ARK affichent une surestimation relative de +0,31 % par rapport à la valeur de NIST, alors que PR donne toujours des valeurs plus élevées pour la masse volumique (environ 7,4 %). Il est à noter que les équations d’état de type SRK et ARK arrivent à épouser les courbes du NIST, sur tout l’intervalle de l’injection froide [85 – 290K], affichant, entre autre une erreur maximale inférieur à +02%.

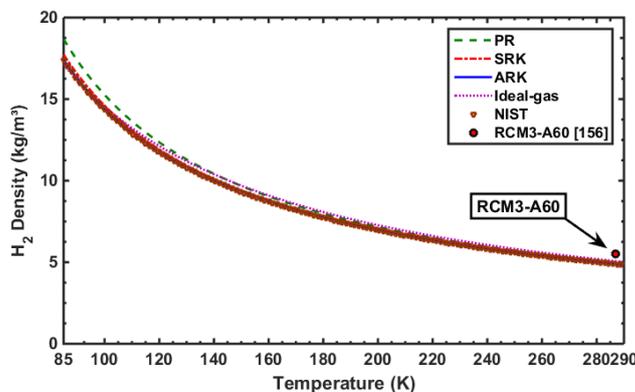


Figure 4.3 : Masse volumique de l’hydrogène H<sub>2</sub> en fonction de la température statique (P = 6 MPa)

La masse volumique du mélange O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> est une fonction de température et fraction molaire des espèces. Comme la température, le volume et la pression critique de l’espèce pure sont différents dans le cas du mélange, l’utilisation des lois de pseudo-critique avec des règles de mélange est impérative pour le calcul de la masse volumique du mélange. Les lois de Lee et Kesler (relation 3.38, 3.39, 3.40) ont été utilisé pour calculer les propriétés critiques vraies de mélange ( $T_{cm}$ ,  $V_{cm}$ ,  $P_{cm}$ ). La masse volumique du mélange a été calculé avec la routine Matlab [160] en utilisant la règle de mélange de Clifford [24] (relation 3.42, 3.43) pour l’EoS SRK et ARK.

La figure 4.4 présente la courbe en 3D de la masse volumique du mélange en fonction de température et fraction molaire du mélange  $O_2/H_2$ . Par rapport à la température une légère surestimation de l'EoS ARK de 1,7 % est noté dans l'intervalle [85 – 120 K] maximal à  $T_{inj,O_2} = 85$  K (comme trouver dans la figure 4.2) par contre dans le reste de l'intervalle [120 – 290 K] les deux courbe sont presque identique et par rapport à la fraction molaire la surestimation maximal de ARK est de 0,8% entre 0,3 et 1,0 % de  $O_2$ .

La masse volumique du mélange est bien estimé par les deux EoS ARK et SRK où ils peuvent être utilisés dans le calcul numérique.

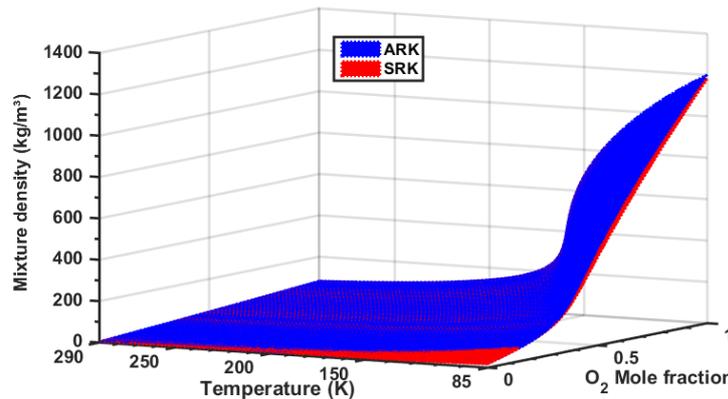


Figure 4.4 : Courbe 3D de la masse volumique du mélange  $O_2/H_2$  en fonction de température et la fraction molaire de l' $O_2$  ( $P = 6$  MPa)

#### 4.4 Analyse CFD de l'injection du N2 supercritique

La modélisation et la simulation d'écoulements réalistes au sein de moteurs fusées /bancs d'essais est basée sur l'utilisation de plusieurs sous-modèles concernant ces différents processus thermiques, dynamiques et chimiques qui peuvent avoir lieu. Les expériences dédiées à la validation de ces différents modèles, ou à la validation d'un code de calcul, doivent être d'une complexité réduite afin de pouvoir isoler les différents processus étudiés. Dans ce sens, l'expérience de Mayer et al. [39] effectuée sur le banc d'essai M51 (figure 4.5) se pose comme un cas test générique pour la validation des différents modèles, ayant pour vocation la reproductivité supercritiques.

Un cas dit RCM1 a été défini dans le Rocket Combustion Modeling Workshop (IWRCM), où la configuration décrit l'injection dans une chambre cylindrique [156]. Pour rappeler que l'International Workshop for Rocket Combustion Modeling Workshop (IWRCM, [156]) est un workshop dédié à des compétitions en simulations numériques, visant à reproduire les conditions d'essai sur des moteurs fusées à échelles réduites. Des conditions aux limites thermiques et dynamiques sont standardisées, ainsi que les niveaux de turbulence à l'injection, afin de s'approcher au mieux des cas de test, via diverses modélisations physico-chimiques, en utilisant une multitude de méthodes numériques. Les données de cas visent à calquer les conditions expérimentales couvertes par Mayer *et al.* dans ses cas de référence 03 et 11 pour les points RCM1-A et RCM1-B, respectivement [39]. Dans l'expérience de Mayer [39],

un jet de  $N_2$  cryogénique et dense est injecté dans une atmosphère d'azote gazeux chaud. Ce cas expérimental, mono-espèce et non-réactif, est particulièrement intéressant du point de vue de la validation, où il permet de s'affranchir des erreurs liées à la complexité de la modélisation du transport multi-espèces et comme étant non réactif, il permet de ne se concentrer que sur le mélange turbulent liquide-gaz. Les données expérimentales disponibles dans la littérature, incluent des mesures par imagerie Raman, du profil axial de la masse volumique effectuées sur les soixante-six premiers millimètres (66 mm) en aval de la sortie de l'injecteur.

Le présent travail concerne un seul cas, il s'agit du cas 03 de Mayer *et al.* [39], ce qui correspond parfaitement au cas RCM1-A du IWRCM [156], tableau 4.3. La pression de la chambre est de 39,7 bars.

Tableau 4.3 : Conditions opératoires de l'injection  $LN_2/GN_2$

RCM1-A	Vitesse d'injection (m/s)	Température d'injection (k)	$Re$
$LN_2$	4,9	120,9	140 000
$GN_2$	00	298	00

Le banc d'essai M51 (figure 4.5a, Annexe A.1.1) est utilisé pour étudier la rupture des jets et le mélange de jets cryogéniques dans des conditions de haute pression. Le banc d'essai consiste d'une chambre cylindrique avec une longueur de 1000 mm et un diamètre intérieur de 122 mm. L'injecteur est non-introduit dans la chambre et centré dans la face d'injection frontale avec une longueur de 90 mm et son diamètre intérieur est de 2,2 mm. Le manifold de l'injecteur a un diamètre de 6 mm (figure 4.5b) [156]. En vertu des dimensions du banc d'essai M51, une représentation axisymétrique du domaine a été adoptée pour les calculs numériques où la géométrie considérée (figure 4.6) est comparable à la chambre M51 [156] avec un injecteur de 90 mm de longueur et 2,2 mm de diamètre, ainsi pour la chambre, une longueur de 1000 mm et un diamètre de 122 mm. Le repère  $(X, r)$  adopté pour la présentation des résultats est à l'entrée de la chambre, avec une description axisymétrique en coordonnées axiale  $(X)$  et radiale  $(r)$  (figure 4.6b).

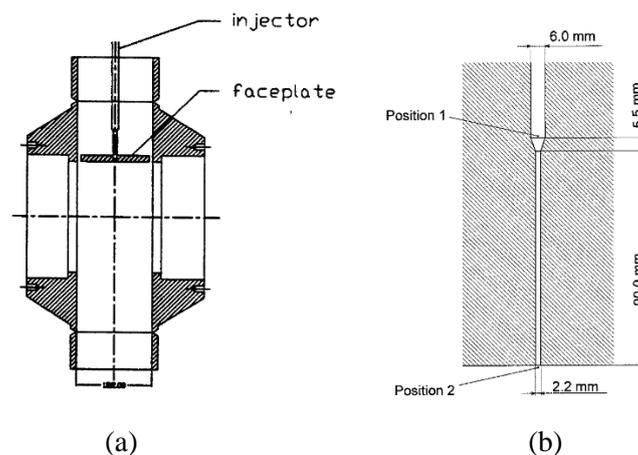


Figure 4.5 : (a) Banc d'essai M51 ; (b) Représentation de l'injecteur et son manifold [156]

Comme couramment utilisé par la communauté des développeurs de modèles numériques, la face d'injection frontale et les parois de l'injecteur sont considérées adiabatiques, tandis qu'une condition isotherme a été fixée pour les parois de la chambre [156].

Les formes moyennes de Favre des équations gouvernantes ont été discrétisées dans une formulation volume finis et résolues numériquement en utilisant le code de calcul Ansys-Fluent [115], avec des lois de comportement (EoS) de type gaz réel. Les constantes du modèle de turbulence avec la correction de Pope devient comme suit :  $c_{1\varepsilon} = 1,44, c'_{2\varepsilon} = 1,87, \sigma_k = 1,0, \sigma_\varepsilon = 1,3$ .

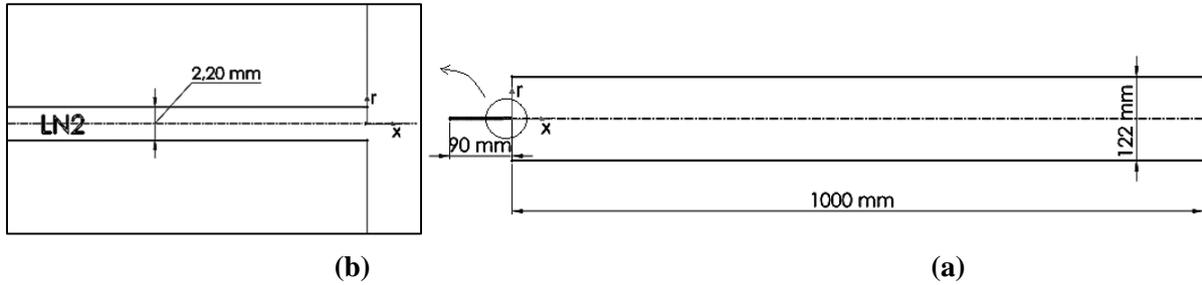


Figure 4.6 (a) Géométrie du domaine de calcul ;(b) Aperçu du modèle d'injecteur

Les équations de continuité, de quantité de mouvement, de la turbulence et de l'énergie, ont été discrétisées avec un schéma décentré amont 'upwind' de premier ordre, et un couplage pression-vitesse de type SIMPLE. Les erreurs cibles ont été fixées à  $10^{-4}$  pour toutes les inconnues, sauf pour la température où un seuil de  $10^{-6}$  a été imposé.

Le domaine de calcul était couvert par une grille structurée, avec un raffinement dans le sens axial en aval de la sortie de l'injecteur (figure 4.7a). Plusieurs grilles ont été utilisées pour vérifier l'indépendance de la masse volumique le long de l'axe de la chambre (figure 4.7b), sur lesquelles un assez bon accord entre mesures et valeurs numériques a pu être obtenu, pour un maillage de 209160 cellules. Cette dernière grille a été retenue pour les calculs numériques. Les grilles grossières, retenues (ligne de base) et raffinées comprennent successivement 167750, 209160 et 285440 cellules, où l'injecteur a été résolu avec  $230 \times 25, 245 \times 28, 270 \times 36$  cellules tandis que  $720 \times 225, 850 \times 238, 1025 \times 269$  cellules ont été utilisées pour la chambre.

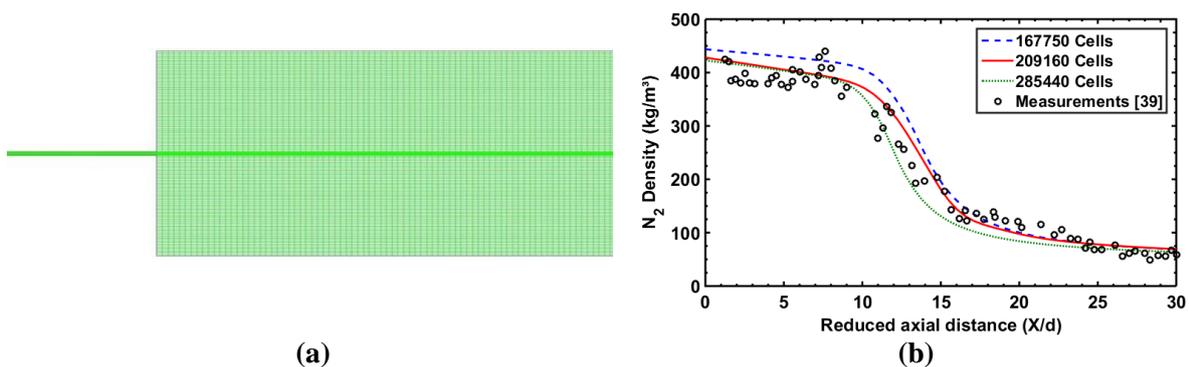


Figure 4.7 (a) Maillage du domaine de calcul ; (b) Analyse de sensibilité de la grille pour la masse volumique sur l'axe.

Avant d'investir l'analyse du jet dans la chambre de combustion, l'historique du jet dans l'injecteur a été reproduit. L'objectif étant de retrouver le profil de vitesse et de la température de jet  $N_2$  en sortie de l'injecteur, tels que mesurés et publiés [39]. Dans cette première partie, la paroi de l'injecteur a été supposée isotherme et égale à la température de la paroi de la chambre  $T_{ch-wall} = T_{inj-wall} = 298$  K, de sorte

que le transfert de chaleur vers le flux de  $N_2$  sera pris en compte. Sachant que le niveau de turbulence n'est pas spécifié dans les mesures, on s'aligne avec la proposition de Farmer *et al.* [161], où l'énergie cinétique turbulente d'entrée  $k$  est quadratiquement liée à la vitesse d'entrée dans l'injecteur, alors que son taux de dissipation  $\varepsilon$ , est estimé en utilisant le diamètre de l'injecteur, comme échelle de longueur intégrale turbulente.

Plusieurs stations axiales ont été considérées (figure 4.8) et la vitesse du jet de  $N_2$  près de la paroi semble importante par rapport aux valeurs de la ligne médiane. Cela révèle une accélération de l'écoulement due à des valeurs de faible masse volumique au voisinage de la paroi de l'injecteur, et ceci est plus prononcé en aval de la station  $x/L_{inj} = 0,88$  et  $x/L_{inj} = 1$ .

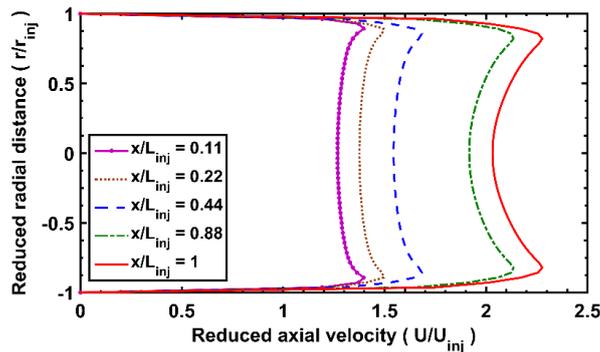


Figure 4.8 Distribution de la vitesse axiale du  $N_2$  le long de l'injecteur

Bien que la vitesse n'ait pas été complètement développée à la section de sortie de l'injecteur, la valeur expérimentale moyenne de 4,90 m/s [39] est numériquement reproduite avec une erreur relative de 0,24% [162].

La figure 4.9 montre la distribution axiale de la masse volumique de  $N_2$  obtenue numériquement en utilisant les équations d'état PR, SRK et ARK, dans le cas d'un injecteur adiabatique. Les valeurs de masse volumique numérique en aval de la sortie de l'injecteur sont confrontées aux mesures Raman de Mayer *et al.* [39].

Comme mentionné dans la section thermodynamique, les mesures de Branam et Mayer à la sortie de l'injecteur fournissent la valeur de  $\rho^* = 400 \text{ kg/m}^3$  [42]. Il est à noter que la courbe PR présente une surestimation relative proche de 42% sur la masse volumique du  $N_2$ , par rapport à la valeur expérimentale  $\rho^*$  en sortie d'injecteur. Dans le même contexte, les équations d'état ARK et SRK prédisent une légère plus faible valeur de masse volumique à la sortie de l'injecteur, correspondant à un écart relatif de 27%. La courbe ARK atteint la valeur expérimentale  $\rho^*$  non pas à la section de sortie de l'injecteur mais loin en aval à  $X/d = 11,2$  ( $A^*$ , figure 4.9). Dans ce cas d'étude adiabatique, la température statique numérique sur l'axe centrale était égale à  $T^* = 126,9 \text{ K}$  au niveau de la station axiale  $X/d = 11,2$  comme indiqué dans la section thermodynamique 4.3.1.

Avec l'équation d'état ARK, les calculs prédisent une valeur de masse volumique presque constante de  $\rho = 507 \text{ kg/m}^3$  sur une distance réduite  $X/d \leq 6,1$  (figure 4.9). Dans cette région du cœur dense, l'écart relatif entre les valeurs numériques de masse volumique de  $N_2$  et les mesures de Mayer *et al.* [12] varie

de 27% à 36%. L'écart global tend à diminuer à 20% ( $\rho = 92 \text{ kg/m}^3$ ) en aval de la station axiale  $X/d = 18$ , où un comportement asymptotique est révélé.

Le manque de données relatives à  $T$  et  $\rho$  à l'entrée de l'injecteur a conduit certains auteurs à concentrer leurs mesures sur la masse volumique de  $N_2$   $\rho^*$  à la sortie de l'injecteur. Étant donné que les simulations numériques nécessitent une température à la section d'entrée de l'injecteur, plusieurs modèles de la littérature ont été suggérés pour modifier la température d'essai prescrite  $T_{inlet} = 120,9 \text{ K}$  (voir Annexe A.1.1) à une valeur légèrement élevée, dans un objectif de retrouver la valeur de  $\rho^*$  à la section de sortie de l'injecteur [94,161,163] et de pouvoir se caler aux mesures publiés [42].

En conséquence, la condition adiabatique adoptée pour la paroi de l'injecteur implique directement un afflux isotherme qui se traduit par la même température à la fois à l'entrée et à la sortie de l'injecteur. De ce fait, la valeur de la température d'entrée  $T_{inlet} = 126,9 \text{ K}$  a été proposée dans le workshop sur la modélisation de la combustion des fusées (IWRCM) [156]. Il convient de noter que l'analyse thermodynamique que nous avons entrepris (section 4.3.1) utilisant ARK comme équation d'état, a pu retrouver la valeur de masse volumique cible ( $\rho^* = 400 \text{ kg/m}^3$ ) à la même température  $T = 126,9 \text{ K}$  (voir figure 4.1a) fixée dans les standards du IWRCM [156].

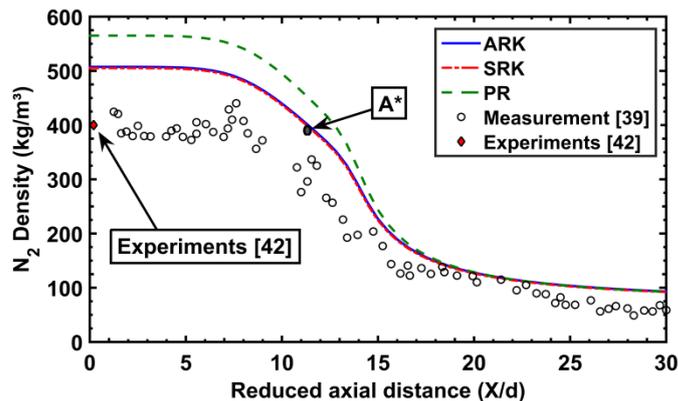


Figure 4.9 Distribution de la masse volumique sur l'axe (cas adiabatique,  $T_{inlet} = 120,9 \text{ K}$ ,  $P = 3,97 \text{ MPa}$ )

En conséquence, nous pensons que le fait de négliger le transfert de chaleur entre les parois de l'injecteur et le jet du  $N_2$  peut inhiber la dilatation thermique, induisant ainsi des valeurs de masse volumique du  $N_2$  élevées à la sortie de l'injecteur. De plus, la température proposée à l'entrée de l'injecteur  $T_{inlet} = 126,9 \text{ K}$  correspond bien à la valeur cible de densité ( $\rho^*$ ). Cette dernière condition d'entrée suppose une température constante du fluide injecté à travers l'injecteur. Par conséquent, le point de fonctionnement d'essai peut donc ne pas être entièrement respecté comme prescrit par Mayer et al. [39], en termes de température.

Les calculs qui vont suivre utilisent une condition de température constante (isotherme) prescrite pour la paroi de l'injecteur, plutôt qu'une condition adiabatique. Comme cela a été clairement indiqué dans l'étude expérimentale de Mayer *et al.* [39]. Le transfert de chaleur dans le tube injecteur est important, en particulier dans les cas plus chauds. En conséquences, il semble raisonnable d'effectuer

des calculs en tenant compte du transfert de chaleur d'une paroi d'injecteur chaude maintenue à température ambiante  $T_{inj\_wall} = 298\text{ K}$  vers le fluide plus froid (126,9K) à l'intérieur de l'injecteur.

La figure 4.10 montre la distribution sur l'axe de la masse volumique de  $N_2$  en aval de la section de sortie de l'injecteur. On observe que pour une condition isotherme, la valeur de masse volumique cible  $\rho^*$  n'est surestimée que de 7% à la sortie de l'injection ( $X/d = 0$ ). La masse volumique correspondante présente un profil quasi-linéaire jusqu'à  $X/d = 10$  suivi d'une forte chute de pente, ce qui souligne une expansion rapide du flux thermique dans la chambre. Globalement, la courbe est conforme aux mesures avec un écart relatif global inférieur à 8% [162].

La chute de masse volumique obtenue sans cœur dense très clair peut être visualisée sur la première partie de la courbe isotherme (Fig. 4.10). Ce comportement avait été retrouvé numériquement par Banuti *et al.*, en utilisant le modèle pseudo-ébullition [93].

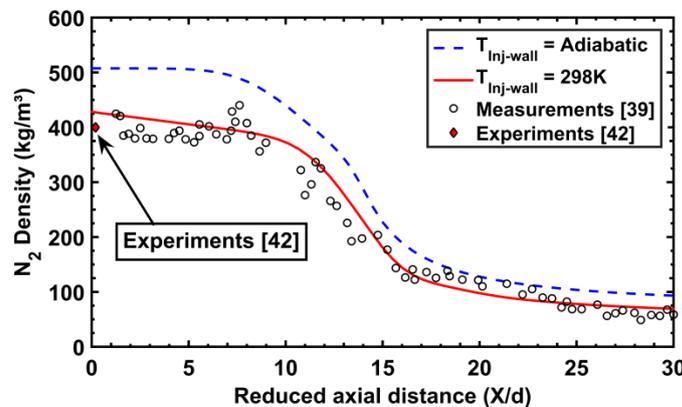


Figure 4.10 Distribution de la masse volumique sur l'axe ( $T_{inlet} = 120,9\text{ K}$ ,  $P = 3,97\text{ MPa}$ )

La figure 4.11 présente la masse volumique sur l'axe central à l'intérieur de l'injecteur. L'effet du transfert thermique de la paroi vers l'écoulement est bien claire entre les conditions aux limites adopté pour le cas adiabatique et le cas isotherme, où la masse volumique reste quasi-constante à la valeur d'injection  $\rho_{inj} = 507\text{ kg/m}^3$  pour le cas adiabatique, tandis que pour le cas isotherme la masse volumique diminue progressivement jusqu'à la sortie de l'injecteur.

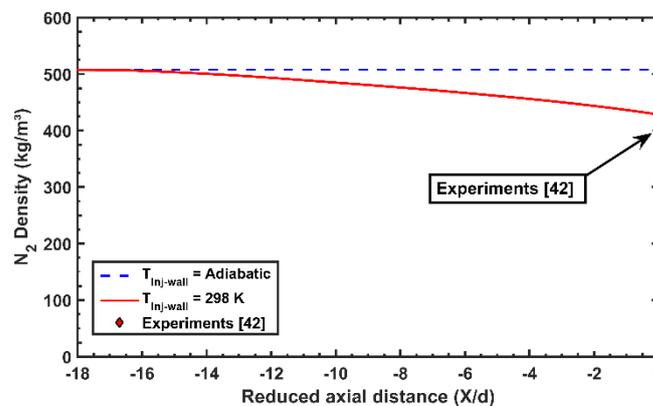


Figure 4.11 Distribution de la masse volumique sur l'axe à l'intérieur de l'injecteur ( $T_{inlet} = 120,9\text{ K}$ ,  $P = 3,97\text{ MPa}$ )

Comme le transfert de chaleur à l'intérieur de l'injecteur affecte à la fois la distribution axiale et radiale de la masse volumique de  $N_2$ , il semble pertinent de présenter la distribution spatiale de la masse volumique à la fois pour l'injecteur adiabatique et l'isotherme. La figure 4.12a illustre le contour de la masse volumique de  $N_2$  à l'intérieur de l'ensemble chambre-injecteur. Pour des fins de clarté, le contour se concentre sur le dernier quart de la longueur de l'injecteur et sur 2,5/100 de la longueur de la chambre.

Il est clairement démontré qu'une couche limite se forme à l'intérieur de l'injecteur avant l'entrée de la chambre pour le cas isotherme. La masse volumique de  $N_2$  augmente progressivement en partant des parois vers l'axe central car la masse volumique diminue par l'effet thermique au voisinage des parois. Le cœur dense atteint la distance axiale  $X \sim 0,020$  m dans le cas adiabatique alors qu'il se termine bien avant à  $X \sim -0,021$  m, et cela avant d'entrer dans la chambre dans le cas isotherme.

Comparant au contour de masse volumique de Banuti *et al.* [92] (figure 4.12b) les résultats obtenus sont globalement très proches. Pour son cas adiabatique, la masse volumique conserve sa valeur jusqu'à l'entrée de la chambre et le cœur dense atteint la station axiale  $X/D \sim 7,2$  ( $X \sim 0,016$ m). Une couche limite est aussi développée à l'intérieur de l'injecteur avec un cœur dense qui atteint la station axiale  $X/D \sim -5$  ( $X \sim -0,012$ m) pour le cas isotherme.

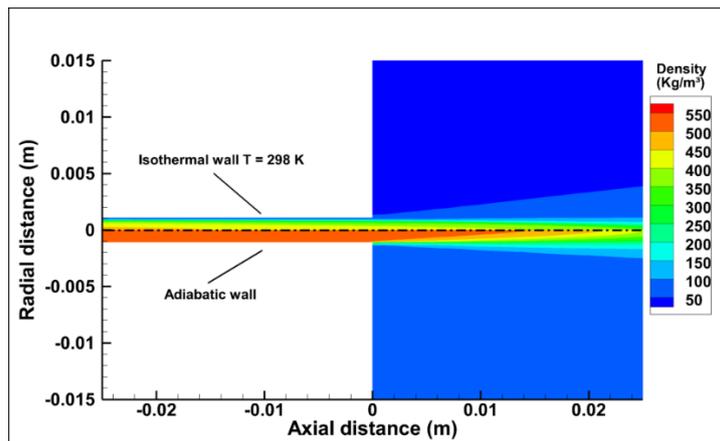


Figure 4.12.a Contours de masse volumique pour les cas, isotherme (en haut) et adiabatique (en bas) pour les parois de l'injecteur

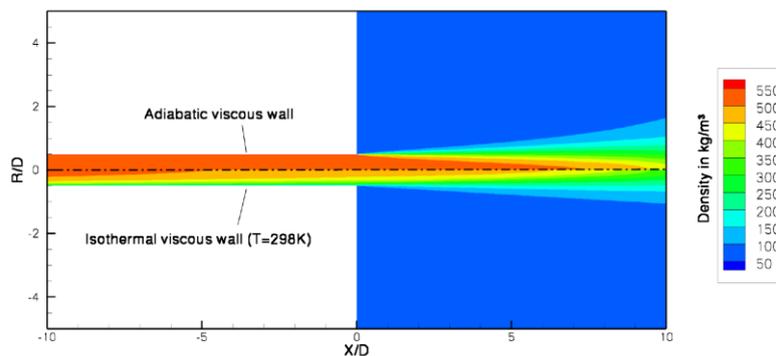


Figure 4.12.b Contours de masse volumique pour les cas, adiabatique (en haut) et isotherme (en bas) pour les parois de l'injecteur selon Banuti *et al.* [92]

Comme c'est le cas classique pour les jets de gaz en sortie d'injecteurs, le cœur potentiel désigne la distance axiale sur laquelle la quantité de mouvement (ou plus spécifiquement la vitesse axiale) demeure quasi-constante et égale à sa valeur en sortie d'injecteur. Pour le cas des jets denses, c'est plutôt la masse volumique, qui est caractéristique du cœur potentiel dense (dense core), censée être quasi-constante – à un % près- puis commencer à décroître sous les effets du cisaillement, de l'épanouissement et du transfert thermique. En absence de seuil maximum pour la caractérisation du cœur dense [164], on adopte une décroissance relative limite de 10%, pour ce cas d'étude [162].

Les valeurs comparatives pour les longueurs de cœur denses, telles que reproduites par les trois modèles corrélatifs (Eq. (2.6), Eq. (2.7), Eq. (2.8)) et les valeurs correspondant au seuil adopté (10%) sont représentées sur la figure 4.13.

Pour le cas adiabatique (figure 4.13a), la valeur numérique pour le cœur dense ( $X \sim 20,5$  mm) est assez bien conforme à celle donnée par le critère de Branam et mayer [42] avec un écart relatif inférieur à +0,5%, alors qu'une sous-estimation de -5%, est notée sur la valeur fournie par le critère de Chehroudi *et al.* [63]. La valeur numérique surestime celle données par le critère de Harsha [43] avec un écart de +34%, ce grand écart est justifiée par la non adaptation du critère de Harsha [43] avec le critère proposé où la corrélation de Harsha [43] ne tient pas en compte le changement de la masse volumique.

Pour le cas de l'injecteur isotherme, la chambre en aval de la sortie de l'injecteur contient toujours un jet dense (figure 4.10). En l'occurrence, la longueur de cœur dense fournie par la corrélation de Branam et mayer [42] n'est surestimée que de +0,23% (figure 4.13b). De plus, une meilleure concordance avec la valeur empirique de Chehroudi *et al.* [63] est reproduite dans le cas de l'injecteur isotherme avec un écart relatif de -1,1%. Tandis que la valeur du cœur dense surestime toujours celle du modèle de Harsha [43] avec un écart relative de +48%.

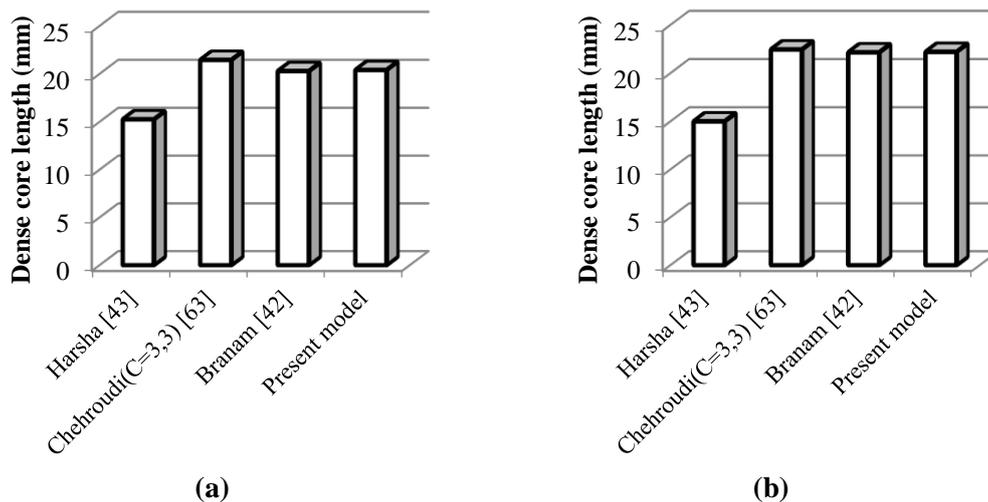


Figure 4.13 Comparatif des longueurs de cœur dense du jet N2 en sortie de l'injecteur coaxial

Dans l'ensemble, le seuil proposé et adopté (10%) pour la masse volumique, calculée sur l'axe centrale, semble bien convenir aux deux cas, isotherme et adiabatique de l'injecteur coaxial, puisqu'il satisfait globalement aux critères les plus usuels, énoncés dans la dynamique des fluides supercritiques.

**4.5. Analyse CFD de l’injection du LOx/GH<sub>2</sub> (‘Cold flow’)**

Afin de caractériser la dynamique d’un mélange binaire, sans combustion (Cold-flow) en régime supercritique, on s’est intéressé au cas test RCM3-A60 [156], pour le couple cryogénique H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> (figure 4.14). Le domaine d’intérêt est comparable à la chambre de combustion du banc d’essai Mascotte (Annexe A.1.4), munie d’une chambre cylindrique et d’un injecteur coaxial introduit partiellement de 10 mm à l’intérieur, de longueur  $L_{inj} = 34$  mm. La chambre a un diamètre de  $D_{ch} = 50$  mm et une longueur de  $L_{ch} = 400$  mm suivant les instructions de l’IWRCM pour les calculs numériques [156]. Le tube de LOx a un diamètre intérieur de  $D_{inj\_ox} = 5$  mm alors que celle du GH<sub>2</sub> est  $D_{inj\_GH_2} = 10$  mm avec des arrêtes des tubes parallèle. L’épaisseur de la lèvre d’injecteur de LOx est de 0,3 mm, où le diamètre extérieur de l’injecteur de LOx est de 5,6 mm (figure 4.14b). Le repère  $(x, r)$  ce localise sur l’axe centrale à l’entrée de l’injecteur (figure 4.14a).

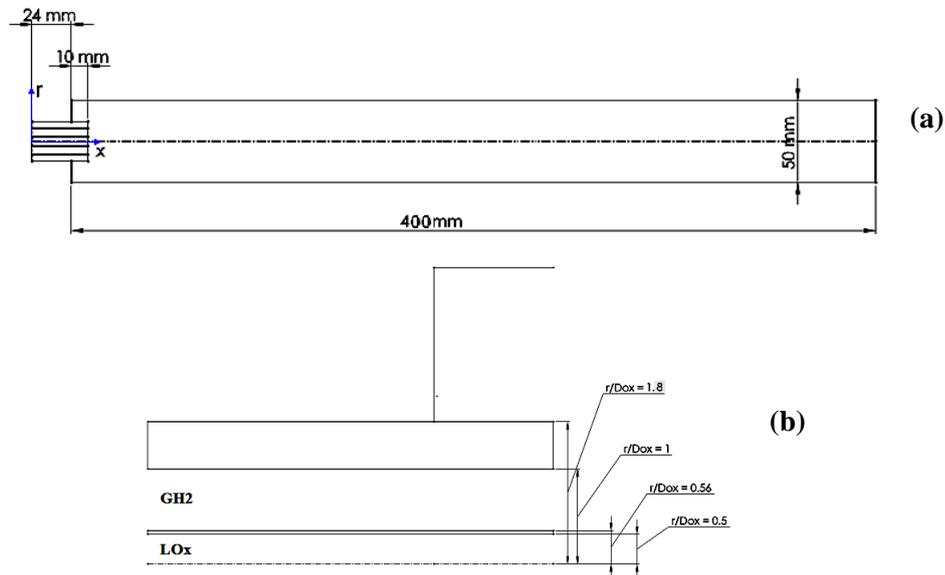


Figure 4.14 (a) Géométrie du domaine de calcul RCM3-A60 ; (b) Dimensions de l’injecteur coaxial

L’injection du LOx est en régime trans-critique à température d’injection de  $T_{inj\_LOx} = 85$  K, alors que pour l’hydrogène GH<sub>2</sub> est en régime supercritique  $T_{inj\_GH_2} = 287$  K [156], tableau 4.4. Le couple LOx/GH<sub>2</sub> est injecté en respectant le rapport de mélange ( $R = \dot{m}_{LOx} / \dot{m}_{GH_2}$ ) pris dans l’expérience et donner dans l’IWRCM pour le point RCM3-A60 comme O/F = 1,4 avec  $\dot{m}_{LOx} = 100$  g/s et  $\dot{m}_{GH_2} = 70$  g/s. L’intensité de turbulence a été fixé dans l’IWRCM par  $I = 5\%$  ( $i^2 = 2/3 k / U_{inj}^2$ ). La pression de chambre a été imposée avec  $P_{ch} = 60$  bars. Comme a été mentionné dans l’IWRCM les parois de l’injecteur et la chambre ont été pris adiabatique [156].

Tableau 4.4 : Conditions opératoires de l’injection LOx/GH<sub>2</sub>

RCM3-A60	Débit à l’injection (g/s)	Température d’injection (k)	Intensité de turbulence (%)
LOx	100	85	05
GH <sub>2</sub>	70	287	05

Le domaine de calcul était couvert par une grille structurée, avec un raffinement dans le sens axial au niveau de la lèvre d'injecteur LOx ainsi au niveau de l'ensemble injecteur-faceplate en aval de la sortie de l'injecteur (figure 4.15a). Plusieurs grilles ont été utilisées pour vérifier l'indépendance de la masse volumique à la sortie d'injecteur au niveau de la station axiale  $x/L_{inj} = 1$  (figure 4.15b), sur lesquelles un assez bon accord entre mesures et valeurs numériques a pu être obtenu, pour un maillage de 326120 et 680600 cellules. La grille de 326120 cellules a été retenue pour les calculs numériques afin d'avoir un faible temps de calcul. Les grilles grossières, retenues (ligne de base) et raffinées comprennent successivement 117545, 326120 et 680600 cellules, où l'injecteur a été résolu avec  $110 \times 22$ ,  $200 \times 38$ ,  $300 \times 70$  cellules tandis que  $1200 \times 95$ ,  $2200 \times 144$ ,  $2500 \times 260$  cellules ont été utilisées pour la chambre.

Les formes moyennes de Favre des équations gouvernantes ont été discrétisées dans une formulation volume finis et résolues numériquement en utilisant le code de calcul Ansys-Fluent [115], avec des lois de comportement (EoS) de type gaz réel. Les constantes du modèle de turbulence avec la correction de Pope devient comme suit :  $c_{1\epsilon} = 1,44$ ,  $c'_{2\epsilon} = 1,87$ ,  $\sigma_k = 1,0$ ,  $\sigma_\epsilon = 1,3$ . Les équations de continuité, de quantité de mouvement, de la turbulence et de l'énergie, ont été discrétisées avec un schéma décentré amont 'upwind' de premier ordre, et un couplage pression-vitesse de type SIMPLEC. Les erreurs cibles ont été fixées à  $10^{-4}$  pour toutes les inconnues, sauf pour la température où un seuil de  $10^{-6}$  a été imposé. Pour le maillage retenu de 326120 cellules, le nombre d'itérations jusqu'à la convergence été d'environ,  $\sim 6000$  it.

Pour ce cas de mélange binaire, on met en relief l'effet du transfert thermique entre le courant central LOx et son co-courant  $\text{GH}_2$ , à 85K et 287K respectivement, juste en sortie de l'injecteur coaxial ( $x/L_{inj} = 1$ ). En cette station axiale, le profil radial de la température statique, pour différentes EoS, sont visibles sur la figure 4.16.

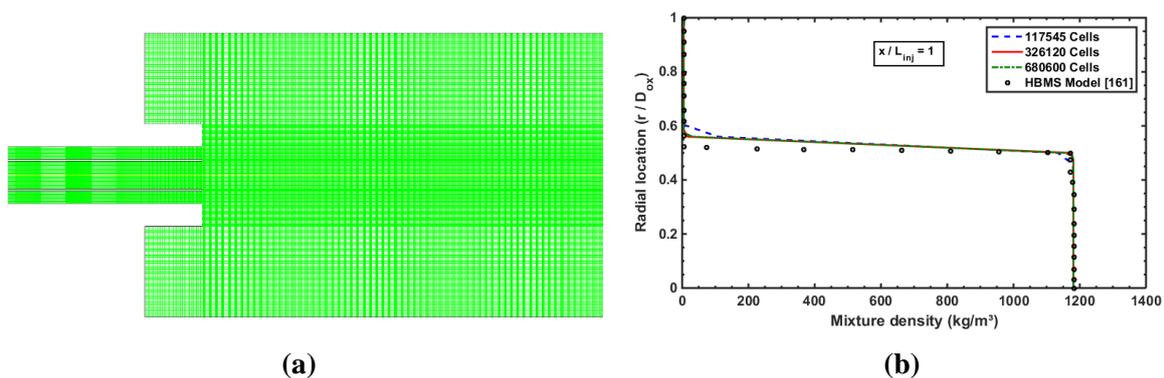


Figure 4.15 : (a) Maillage du domaine de calcul ; (b) Analyse de sensibilité de la grille pour la masse volumique en sortie d'injecteur.

Il est clair que la température statique présente un comportement par morceaux. En effet, on passe de 80 K à travers une distance radiale  $r = 0,5 * D_{ox}$  correspondant au courant d'oxygène pur à 287 K pour le co-courant d'hydrogène à  $r > 0,56 * D_{ox}$ . La zone intermédiaire, de très faible épaisseur ( $e = 0,3$  mm) caractérise la couche de mélange dans l'aval de la lèvre de l'injecteur LOx. Le raffinement de la grille

en cette zone interface, a permis de générer plusieurs cellules, améliorant la qualité de l'interpolation, rendant entre autre un tracé quasi-continu du profil de température (figure 4.16).

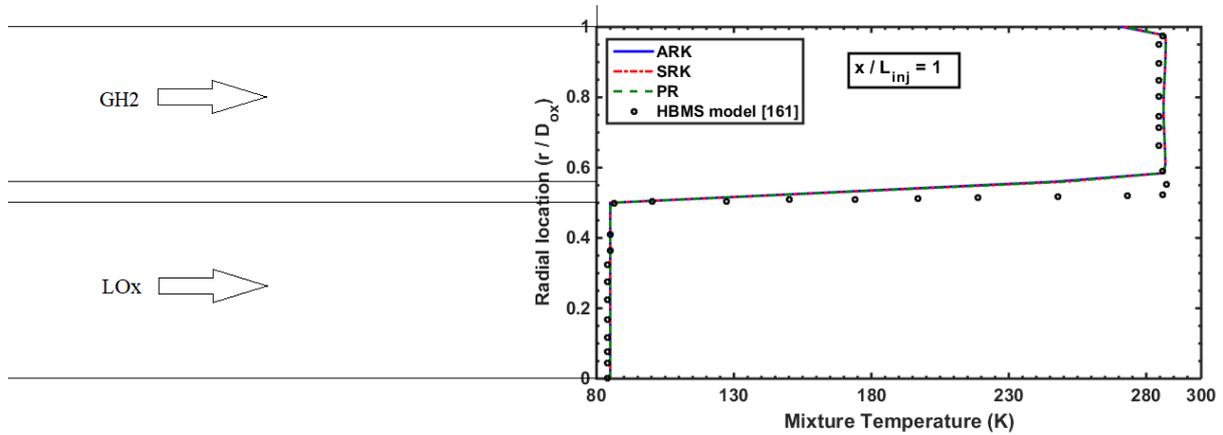


Figure 4.16 : Profil radial de la température en sortie d'injecteur

Un bon accord est reproduit quant à l'utilisation de différentes équations d'état (EoS) pour le mélange en sortie d'injecteur, avec un faible écart relatif ( $\sim 1\%$ ) noté avec les prédictions de Farmer *et al.* [161], basées sur le code HMBS, qui utilise le principe des états correspondants.

La couche de mélange est mieux représentée sur le contour spatial de la température, avec le cas de l'équation d'état SRK (figure 4.17).

La diffusion thermique paraît plus prononcée dans le sens radial, puisque le mélange atteint des températures supérieures à 200 K, après quelques millimètres, en sortie de l'injecteur LOx (courant froid). Ceci paraît évident puisque c'est le courant gazeux (GH<sub>2</sub>) le plus chaud qui enveloppe le jet froid et contribue à l'amélioration de la diffusion de la chaleur. Dans le prolongement axial du courant LOx, la température semble toujours faible ( $< 100$  K) sur une distance conséquente ( $x = 59$  mm).

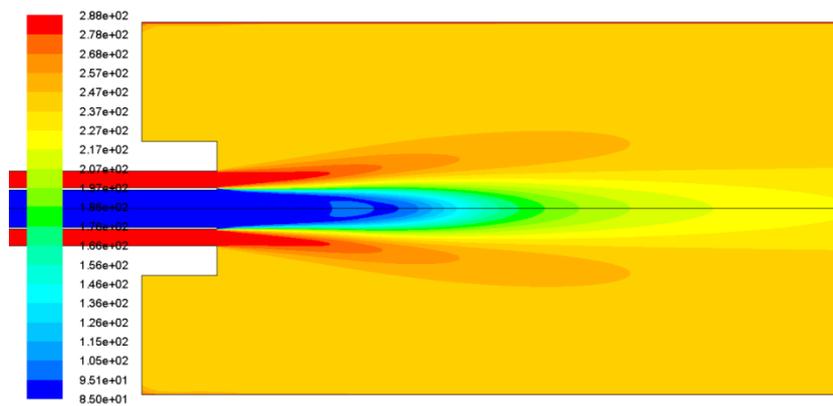


Figure 4.17 : Contour de la température statique (mélange LOx/ GH<sub>2</sub>, SRK)

La dynamique du mélange LOx-GH<sub>2</sub> peut aussi être caractérisée d'abord, à partir de la station axiale  $x/L_{inj} = 1$ . La figure 4.18 dresse les profils de la vitesse axiale pour différentes EoS. En sortie d'injecteur LOx, les équations d'état de type gaz rée (PR, SRK, ARK) reproduisent quasiment le même profil de vitesse axiale, avec une allure confondue aux calculs HBMS [161]. Un profil de type Poiseuille est établi pour le cas du GH<sub>2</sub>, l'écart relatif entre les équations d'état est extrémal sur l'axe central du jet

d'hydrogène ( $r/D_{ox} = 0,78$ ). On remarque que la loi des gaz parfait semble bien épouser le profil, issu des calculs HBMS avec un écart inférieur à 3% (figure 4.18).

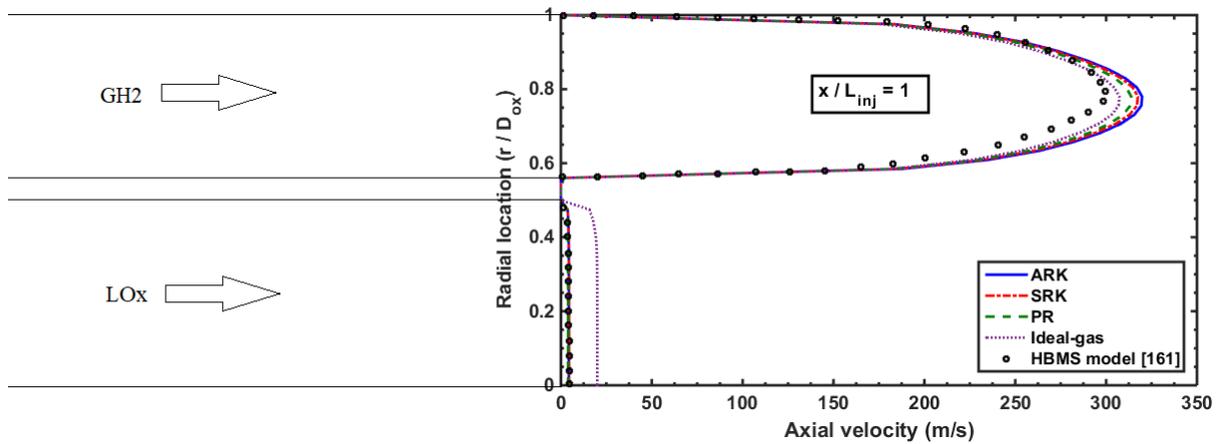


Figure 4.18 : Profils de vitesse axiale par rapport au calcul CFD de Farmer *et al.* [161]

La figure 4.19 présente la masse volumique sur l'axe centrale  $r/D_{ox} = 0$  de la chambre, deux points de validation sont utilisés le point expérimental RCM3-A60 à l'entrée de l'injecteur  $x/D_{ox} = 0$  et le point du modèle HBMS à la sortie de l'injecteur  $x/D_{ox} = 6,8$  [161]. L'équation SRK est la plus proche à ces deux points avec moins de 0,2% de surestimation, l'équation ARK est aussi pas loin des deux valeurs de validation avec une surestimation de 1,55 % par contre l'équation PR surestime la valeur HBMS avec 12%. Comme a été observé sur les calculs thermodynamique figure 4.2 l'équation des gaz parfait manifeste une importante sous-estimation de 77% dans l'injecteur d'oxygène et dans le voisinage de la sortie d'injecteur sur l'intervalle  $x/D_{ox} [0, 10]$ .

L'écart observé sur la vitesse axiale (figure 4.18) au niveau de l'axe de l'injecteur H<sub>2</sub> ( $r/D_{ox} = 0,78$ ) pour les trois EoS est due à la surestimation de la masse volumique notée sur la figure 4.19.

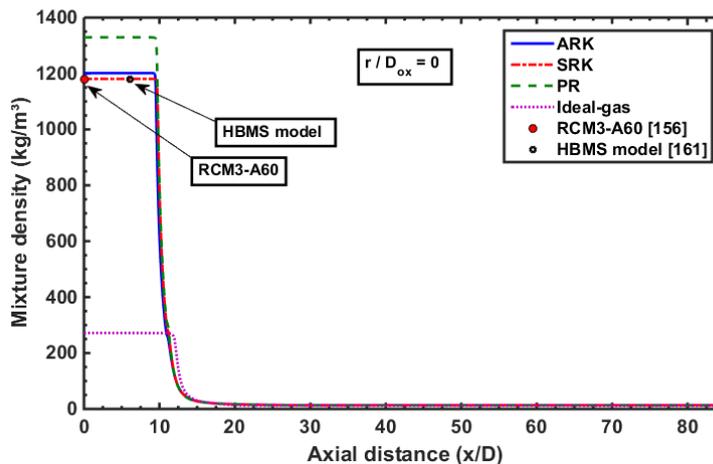


Figure 4.19 : Profils de la masse volumique sur l'axe ( $r/D_{ox} = 0$ )

Après une distance supérieure à  $10D_{ox}$ , le transfert thermique entre le courant chaud GH<sub>2</sub> et le jet froid LOx, semble s'établir, puisque la masse volumique du mélange présente un comportement asymptotique, indépendamment du type de loi de comportement, y compris celle des gaz parfaits.

La masse volumique observée radialement sur la station axiale  $x/L_{inj} = 1$  (figure 4.20a) confirme les résultats de la masse volumique sur l'axe centrale (figure 4.19) où l'EoS SRK présente des valeurs presque identique aux valeurs du modèle HBMS sur le rayon de l'injecteur  $O_2$ . De même, l'EoS ARK présente une faible surestimation avec 1,5% Alors que l'EoS PR la surestimation est de 12%. Au niveau du rayon d'hydrogène les trois EoS sous-estiment les valeurs HBMS de -13% (figure 4.20b). Une chute brusque de la masse volumique est aussi notée pour les calculs HBMS, par contre la couche de mélange avec dégradation continu de la masse volumique est bien présenter pour les trois EoS.

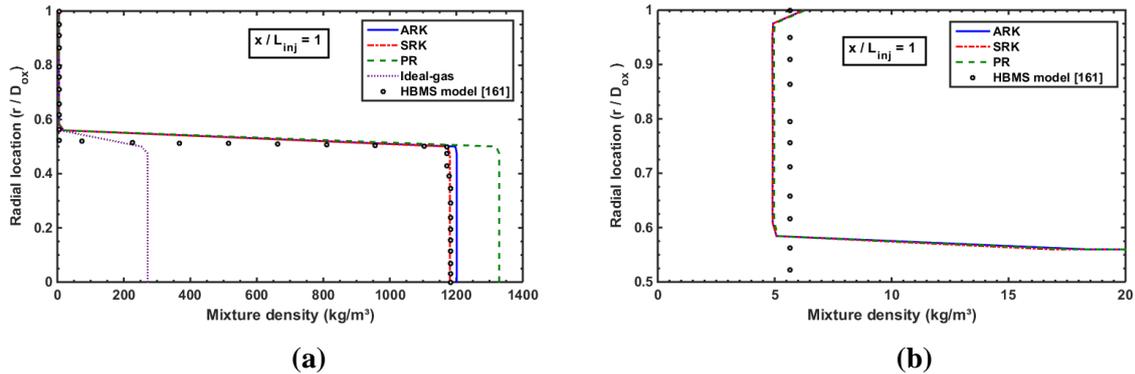


Figure 4.20 : (a) Profils de masse volumique sur la station axiale ( $x/L_{inj} = 1$ )

Quant au mélange des réactifs, la distribution de la fraction de mélange  $f$  (Eq. 3.21) sur l'axe central de la chambre de combustion, reproduit bien le jet d'oxygène pur (oxydant) à l'intérieur du canal de l'injecteur ( $x < L_{inj}$ ) ainsi qu'en la région avale à l'injecteur où les EoS de ARK, SRK et PR manifestent pratiquement le même profil le long de l'axe centrale (figure 4.21a). Cependant, pour une loi de comportement de type gaz parfait, le mélange entre réactifs ne se manifeste pas exactement en sortie d'injecteur, comme c'est le cas pour les autres EOS, ce qui signifie que le cœur potentiel de l'oxygène est plus avancé par rapport aux autres EoS.

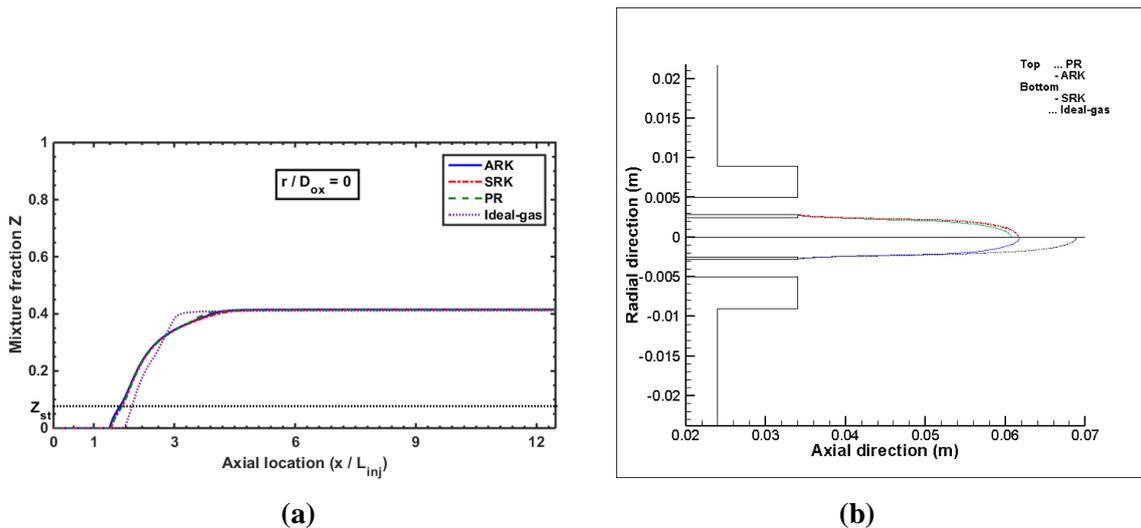


Figure 4.21 : (a) Profils de la fraction de mélange sur l'axe ( $r / D_{ox} = 0$ ) ; (b) Fraction de mélange stœchiométrique ( $Iso-f_{st}$ )

Le taux de mélange en aval de la sortie d'injecteur, paraît tendre asymptotiquement vers une valeur limite ( $f_\infty = 0,415$ ) identique pour tous les équations utilisées.

La fraction de mélange stœchiométrique qui représente la flamme présumée ( $f_{st} = 0,11$ ) paraît bien attachée aux lèvres de l'injecteur (figure 4.21b), révélant une longueur visible  $L_f \approx 0,06$  (m) pour les équations PR, ARK, SRK alors que pour l'équation des gaz parfait est de  $L_f \approx 0,07$  (m).

#### 4.6. Analyse CFD de la structure de flamme O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub> ('Hot fire')

L'étude numérique du cas réactif du couple H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> pour le cas test RCM3-A60 [156], a été réalisée avec le même domaine de calcul, maillage et discrétisation numérique des équations gouvernantes que le cas non réactif. Dans cette partie d'étude et afin de mieux comparer par rapport aux résultats de validation le repère ( $X,r$ ) ce localise sur l'axe centrale et à l'entrée de la chambre (figure 4.22).

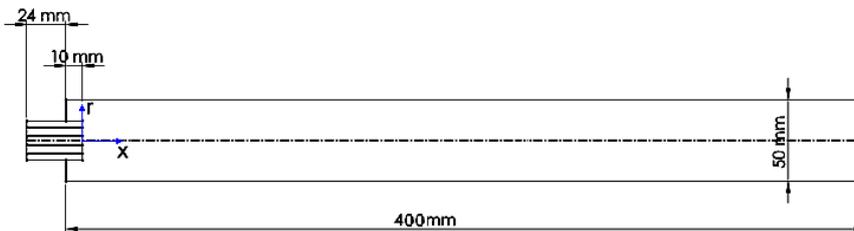


Figure 4.22 Géométrie du domaine de calcul RCM3-A60

Deux modèles de combustion ont été utilisés pour l'analyse de la structure de flamme où le modèle PDF (fonction de probabilité de densité) défini dans la section (3.6.1.B) est comparé au modèle Flammelettes (FLT) défini dans la section (3.6.C). Vu l'utilisation de ces modèles avec comportement de gaz parfait et afin de garder le même rapport de mélange ( $R = \dot{m}_{LOx}/\dot{m}_{GH_2}$ ) pris dans l'expérience, utiliser dans le cas non réactif et donner dans l'IWRCM pour le point RCM3-A60 comme O/F = 1,4 et avec  $\dot{m}_{LOx} = 100$  g/s et  $\dot{m}_{GH_2} = 70$  g/s, l'oxygène est pris à l'état gazeuse avec ajustement de la vitesse d'injection d'O<sub>2</sub> à 18,8 m/s. Ainsi le nombre de Lewis égale à l'unité ( $Le = 1$ ) qui signifie l'indépendance des propriétés de transport en phase gazeuse de la pression et de la température.

La table du modèle PDF prend tous les espèces réactives dans la combustion du couple H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> et donne neuf '09' espèces O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, OH, H, O, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, HO<sub>2</sub> et O<sub>3</sub> en ordre décroissant des fractions massiques dans le résultat final. Pour la flamme de diffusion à contre-courant (modèle de FLT), le mécanisme de réaction développé par, O Conaire et al. [165] est employé (Annexe A.2). Il prend 8 espèces réactives (O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, OH, H, O, H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>, HO<sub>2</sub>) avec 19 réactions réversibles pour le couple H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub>. La validation par rapport aux données expérimentales a été réalisée avec succès par ces auteurs pour des températures allant de 298 à 2700 K et des pressions de 0,05 à 87 atm [165]. L'influence de l'application de différents mécanismes de réaction détaillés a été testée par Ribert et al. [97]. Comme les résultats se sont avérés presque identiques pour tous les mécanismes appliqués, seul le mécanisme O Conaire est considéré dans cette étude. Le nombre de flammelettes utiliser dans la table FLT est de 20 flammelettes avec un scalaire de dissipation  $\chi$  varie entre 0 et 1000 (1/s) avec une incrémentation de 50.

La figure 4.23 montre une comparaison de la température entre les deux tables PDF et FLT en fonction de la fraction du mélange. Les deux table présentent quasiment le même profil de température. La température maximal 3647 K pour PDF et 3644 K pour FLT est noté au point de la fraction de mélange stœchiométrique  $f_{st} = 0,11$ .

Les espèces réactives ont été divisées en deux groupes, les espèces majeures ( $O_2$ ,  $H_2$ ,  $H_2O$ ,  $OH$ ) et mineures ( $H$ ,  $O$ ,  $H_2O_2$ ,  $HO_2$ ). Puisque les deux tables ont des valeurs très proches des fractions massiques d'espèces réactives, la figure 4.24 présent les résultats de la table FLT. Comme a montré la figure 4.23, la production du  $H_2O$  et  $OH$  est au voisinage du point  $f_{st}$  (zone d'inflammabilité), de même il est bien claire la consommation du  $O_2$  et  $H_2$  dans cette zone et l'état du mélange qui correspond à la zone de l'oxydant ( $O_2$ ) lorsque  $f = 0$ , et la zone de combustible ( $H_2$ ) lorsque  $f = 1$  (figure 4.24a). La présence des espèces  $H$  et  $O$  dans le résultat de la table est un peu modeste, alors que les fractions massiques du  $H_2O_2$  et  $HO_2$  sont presque nulle (figure 4.24b) et de même pour le neuvième 09ème espèces de la table PDF l'ozone  $O_3$ . Pour cela la comparaison entre les deux modèle PDF et FLT reste valide avec 08 espèces.

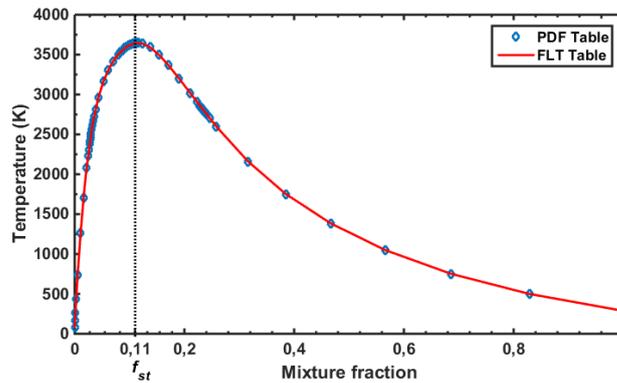


Figure 4.23 Température moyenne en fonction de la fraction de mélange  $f$  selon les tables PDF et FLT

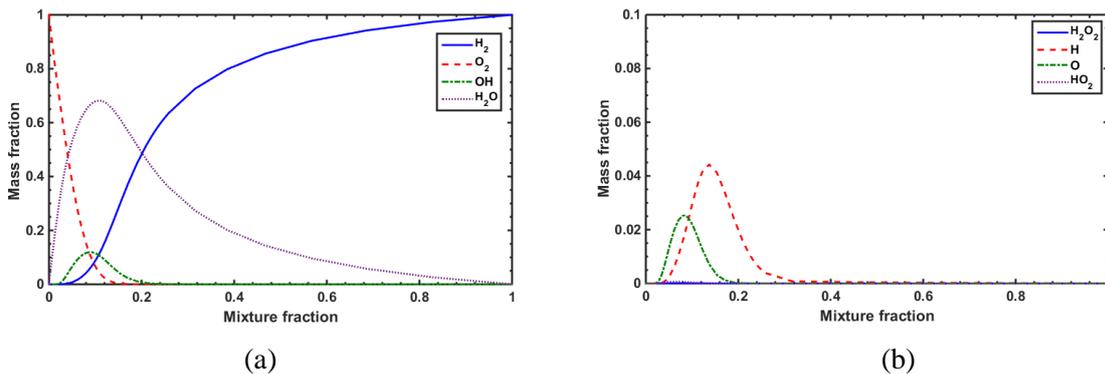


Figure 4.24 Fraction massique des espèces majeures (a) et espèces mineures (Table FLT)

Quant au calcul du cas réactif avec le modèle PDR et en raison de l'injection d'oxygène en état gazeux, la masse volumique du mélange à baisser de 77 % au voisinage de la sortie d'injecteur ( $X/D_{ox} = 0$ ) par rapport au cas non réactif en utilisant l'EoS SRK (figure 4.25). Le cœur dense de l'oxygène est plus important dans le cas réactif avec une longueur d'environ  $X/D_{ox} \sim 17$  car la flamme de diffusion enveloppe le jet d'oxygène (figure 4.26) alors que dans le cas non réactif la longueur du cœur dense est de  $X/D_{ox} \sim 2,7$  et la diffusion de l'hydrogène par mélange turbulent, provoque une décroissance assez

rapide et à forte pente, de la masse volumique du mélange, indépendamment du type de la loi de comportement (figure 4.19). Au-delà de la station axiale  $X/D_{ox} \sim 25$ , la masse volumique du mélange pour le cas non-réactif tendre asymptotiquement vers une valeur limite de  $13,68 \text{ kg/m}^3$  et pour le cas réactif la valeur limite est de  $2,21 \text{ kg/m}^3$  qui caractérise la masse volumique des gaz brûlés.

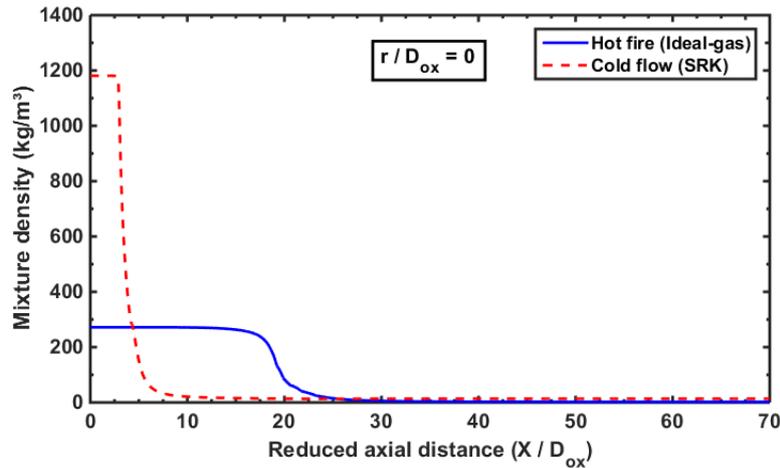


Figure 4.25 La masse volumique du mélange sur l'axe ( $r / D_{ox} = 0$ , PDF)

La figure 4.26 présente la comparaison entre les contours de température de la flamme (PDF et FLT, figure 4.26c) et les contours donnés par Pohl *et al.* [81]. Ces derniers auteurs ont étudiés la structure de la flamme de la combustion du point RCM3-A60 par le biais du code commerciale Ansys-CFX avec l'utilisation du modèle de combustion à flammelles et le mécanisme réactionnelle de O Conaire [165] mais avec considération des lois de comportement de type gaz parfait et gaz réel (PR EoS) pour le jet  $\text{H}_2/\text{O}_2$  et la table flammelles. Ainsi le nombre de  $Le$  a été pris égale à 1 pour les cas présentés dans la figure 4.26.

La comparaison entre les modèles PDF et FLT (figure 4.26c) montre que la température de flamme est presque identique pour les deux modèles avec un pic de  $T_{max} \sim 2900 \text{ K}$ , sauf que la longueur de flamme (position axiale) est plus long pour le cas PDF où la température maximale sur l'axe est atteinte à la distance axiale de 190 mm pour le modèle PDF et de 183 mm pour le modèle FLT.

En remarquant que l'épanouissement de la flamme est bien développée dans notre cas (14 mm, figure 4.26c) par rapport au cas du gaz parfait – flammelles parfait qui ne dépasse pas les 10 mm sur la position radiale (figure 4.26a) que importe le modèle de combustion utilisé (FLT ou PDF), ce qui est mieux développé dans le cas du gaz réel – flammelles parfait / réel (16 mm, figure 4.26b). Ce développement d'épanouissement est grâce à l'utilisation de la correction de Pope dans le modèle de turbulence.

Quant à la longueur de flamme, le modèle FLT avec 183 mm de longueur est le plus proche au modèle gaz parfait – flammelles parfait de  $\sim 180 \text{ mm}$  de longueur de flamme, alors que le modèle gaz réel – flammelles parfait / réel de Pohl *et al* [81] présente une longueur plus courte de  $\sim 160 \text{ mm}$ .

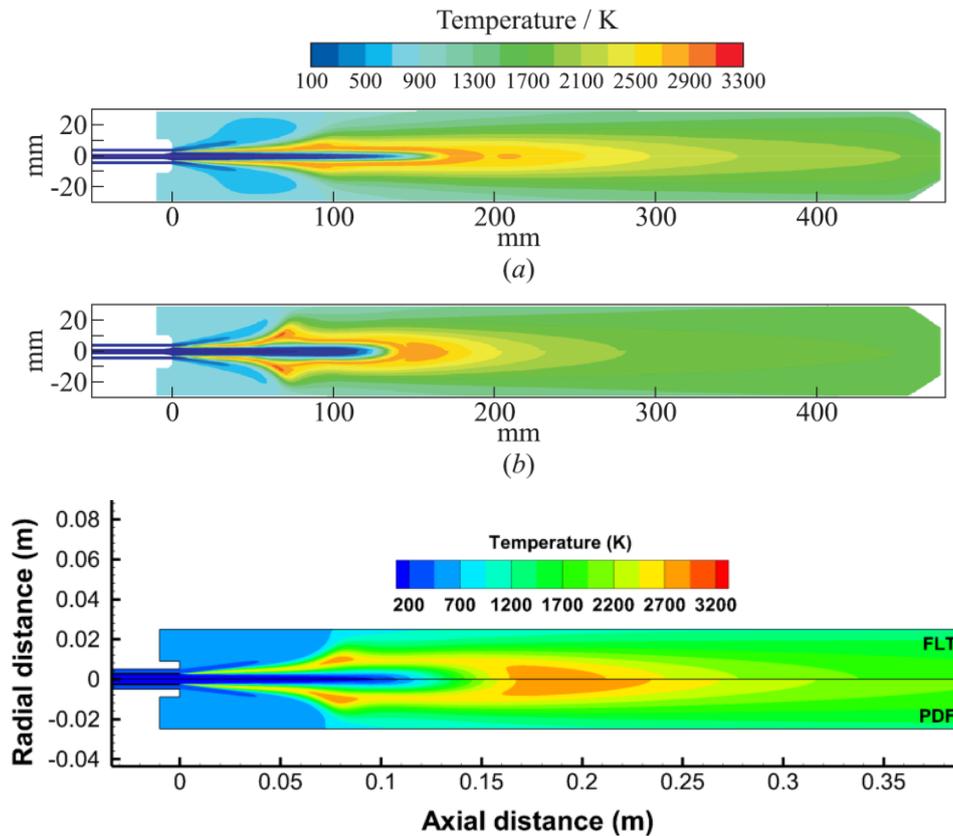


Figure 4.26 Comparaison des contours de température (a) Gas parfait – flammelettes parfait ; (b) en haut gas réel – flammelettes parfait, en bas gas réel – flammelettes réel [81] ; (c) en haut FLT model, en bas PDF model.

En forme générale la structure de la flamme des modèles FLT et PDF est très similaire à celle trouvée dans les calculs RANS avec flammelettes par Poschner et al [75] (figure 4.27b, en bas). Que ce soit dans l'épanouissement ou la forme de la fermeture de la flamme.

La figure 4.27a montre un aperçu des contours de température pour les modèles PDF et FLT sur la zone d'injection où la flamme résultante est d'une épaisseur très fine bien attaché aux lèvres de l'injecteur et son front est confiné à proximité du jet d'oxygène. Ces caractéristiques de flamme ont été illustrées expérimentalement par Haidn et al. [166] où la flamme d'hydrogène est ancrée aux lèvres des injecteurs par rapport aux flammes d'hydrocarbures qui présentent une zone de réaction relativement distancée. Dans le cas d'un écoulement hautement turbulent, cela permet l'encrage et la stabilisation de la flamme. L'absence de l'atomisation dans le régime supercritique, conduit à une zone de réaction intense mais limitée, du fait que la combustion est conditionnée seulement par le mélange des propergols.

Dans le cas réactif, l'utilisation d'une loi de comportement de type gaz parfait ou réel ce manifeste seulement en aval proche de la sortie d'injecteur ce qui justifie la déviation des profils PDF et FLT par rapport au profil FLT de Poschner *et al* [75] au niveau des stations axiales  $X/D_{ox} = [20-28]$  (figure 4.28). De même la forte pente présentée par les résultats gaz réel – flammelettes réel de Poschner [75], a été

observé dans les profils de la masse volumique sur l'axe (figure 4.25) pour les cas réactif avec gaz parfait et non-réactif avec gaz réel SRK comme loi de comportement.

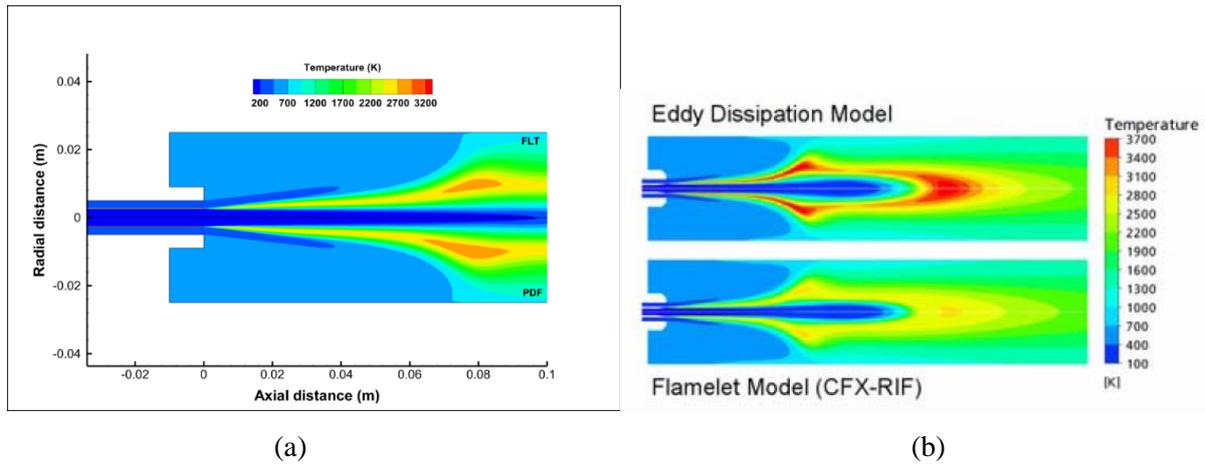


Figure 4.27 (a) Aperçu du contour de température sur la zone d'injection ; (b) Contours de température avec les modèles EDM et flammelettes [75]

En addition, comme a été constaté dans la comparaison des contours de température (figure 4.26), la flamme des présentes modèles PDF et FLT est un peu long par rapport aux résultats de FLT réels [75,81] où le pic de la température sur l'axe centrale du modèle FLT est plus long de 20% alors que pour le modèle PDF est de 24%. Quant à la valeur du pic de température le présent modèle FLT est le plus proche aux résultats de validation [75] avec une surestimation de 1,2%, alors que le modèle PDF présente une surestimation de 3,6%. Du fait du retard de la flamme et ça longueur signifiante pour les deux modèle PDF et FLT la valeur limite de température est plus élevée en aval de la fermeture de flamme, avec une surestimation de 6,9% pour le cas FLT et de 16% pour le cas PDF.

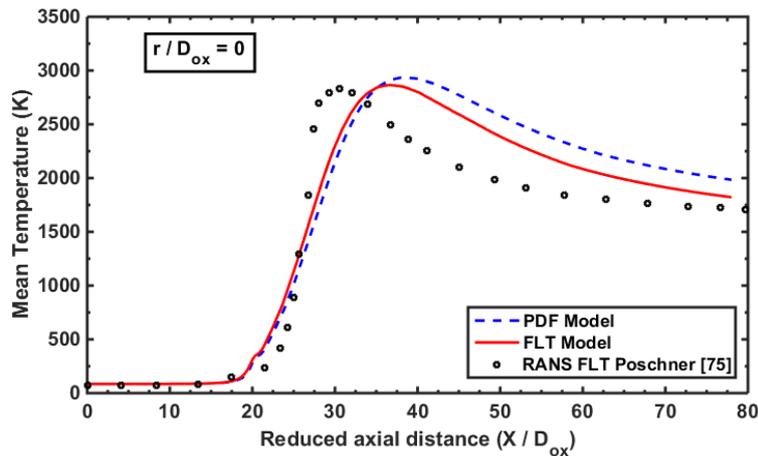


Figure 4.28 Température moyenne de flamme sur l'axe ( $r / D_{ox} = 0$ )

Vu que le pic de température sur les tables PDF et FLT ce manifeste au point de la fraction de mélange stœchiométrique  $f_{st}$  (figure 4.23). La distribution spatiale de la fraction de mélange stœchiométrique (Iso- $f_{st}$ ) pour les deux modèles de combustion est illustrée sur la figure 4.29. La fraction de mélange stœchiométrique caractérise la structure et la longueur présumée de la flamme, où le modèle FLT présente  $\sim 177$  mm de longueur, tandis que pour le modèle PDF elle est de  $\sim 185$  mm. La

distribution de la température de flamme ( $T_{st}$ ) à  $f = f_{st}$  donne un profil identique à la fraction de mélange stœchiométrique (Iso- $f_{st}$ ).

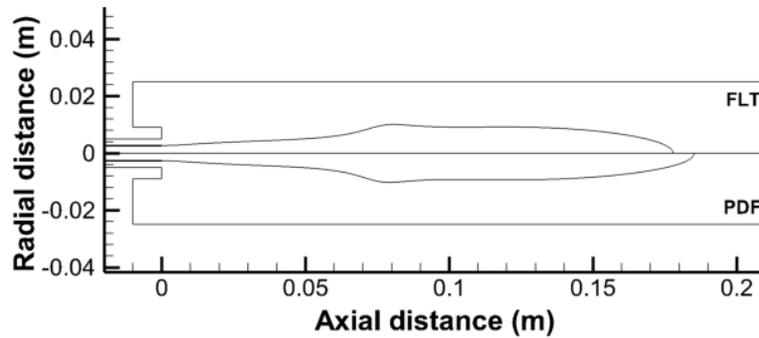


Figure 4.29 Distribution spatiale de la fraction du mélange stœchiométrique (Iso- $f_{st}$ ) et la température de flamme ( $T_{st}$ )

La distribution spatiale du radical hydroxyle OH a une importante signification sur la structure d'une flamme. La figure 4.30 illustre la comparaison entre les deux modèles de combustion PDF et FLT où la valeur maximale de la fraction massique du OH de  $\sim 0,052$  constaté à une distance axial de  $X = 190$  pour le modèle FLT tandis que pour le modèle PDF est plus en avant avec  $X = 199$  et puisque l'épanouissement des deux modèles de flamme ce localise pratiquement à la même région  $X = [0,06 - 0,08m]$  cela confirme que la flamme PDF est plus long que celle du modèle FLT.

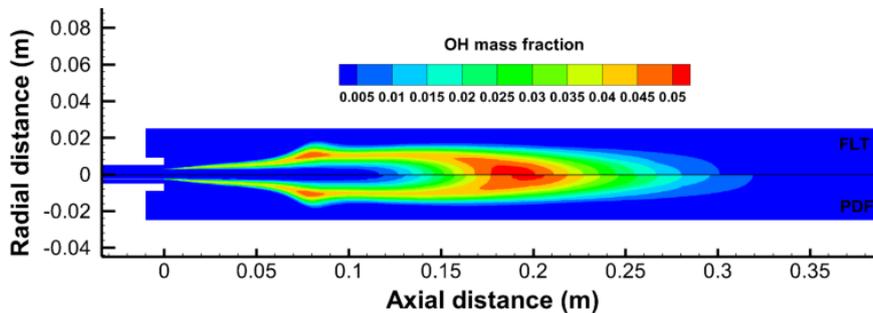


Figure 4.30 Contours de la fraction massique du OH

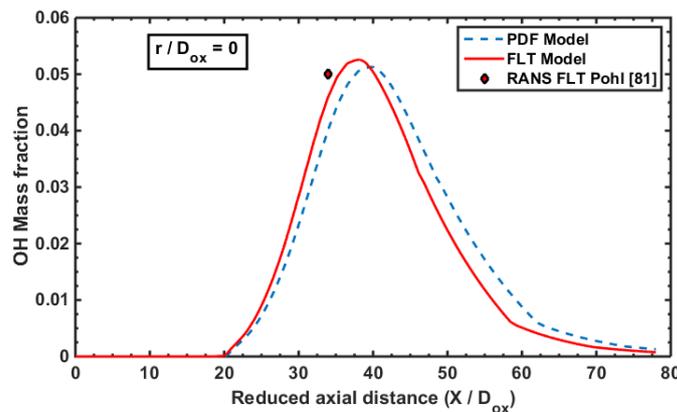


Figure 4.31 Profils de la fraction massique du OH sur l'axe central ( $r/D_{ox} = 0$ )

La figure 4.31 présente les profils de la fraction massique du OH sur l'axe centrale du domaine de calcul pour les modèles de combustion PDF et FLT et le pic du radical hydroxyle OH (0.049) des

résultats RANS avec gaz réel – flammelettes réel du Pohl *et al* [81] positionner a une distance égale à  $X/D_{ox}=34$  de la sortie d’injecteur. Cette valeur du pic d’OH est surestimée par le modèle PDF de 4,7% et de 7,3% pour le modèle FLT. Tandis que le pic du modèle FLT est plus proche en termes de position axial avec 12% que le modèle PDF avec 17%.

Malheureusement, aucune donnée expérimentale de température n'est disponible pour valider les résultats numériques. Seule l'image LIF (Laser Induced Fluorescence) avec transformées d’Abel du radical hydroxyle OH, de l’expérience est disponible pour vérification [57]. La comparaison des concentrations d’OH en aval de la sortie d’injecteur est illustrée sur la figure 4.32. Il convient de noter qu’aucune échelle axiale ou radiale n'est donnée pour les données LIF.

Par rapport aux résultats numériques gaz réel – flammelettes réel de Pohl et al. [81] l’épanouissement est un peu retardé comme a été démontré auparavant mais la distribution de la fraction massique du radical hydroxyle OH de manière générale est très similaire quel que soit le modèle de combustion utilisé.

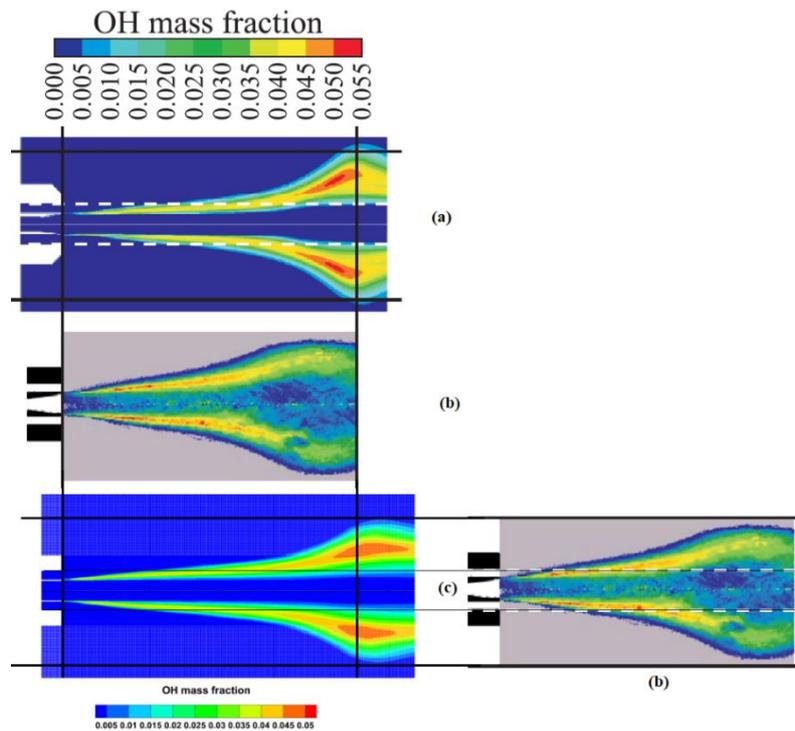


Figure 4.32 Comparaison des contours de la fraction massique du OH, (a) gaz réel – flammelettes réel [81] ; (b) Images du champ moyen et transformées d’Abel d’une flamme cryogénique  $H_2 / O_2$  [57] ; (c) en haut FLT modèle, en bas PDF modèle

De même, par rapport aux résultats expérimentaux [57] (figure 4.32b), il est bien noté que la flamme des modèles PDF et FLT est un peu plus étiré en avant. Qualitativement, la zone de flamme et l’angle d’expansion (l’épanouissement) correspondent bien à ceux des images OH. Étant donné que l’emplacement de la flamme et l’angle de dilatation sont déterminés par le mélange et la réaction des propergols [74], la similitude qualitative indique que les modèles PDF et FLT prédit raisonnablement le mélange de turbulence et la structure de flamme. Les modèle de combustion PDF et FLT avec une loi

de comportement de type gaz parfait sont donc capables de simuler la combustion de pulvérisation supercritique.

#### 4.7. Conclusion

La simulation numérique de la combustion en supercritique implique des études détaillées sur tous les phénomènes qui fait apparaître dans ce régime d'écoulement. L'absence de l'atomisation primaire et secondaire en régime supercritique et les calculs des nombres caractéristique pour l'injection  $\text{LN}_2/\text{GN}_2$  et  $\text{LOx}/\text{GH}_2$  nous a conduit à utiliser une approche monophasique en gaz réel avec description Eulérienne. L'injection du  $\text{LN}_2$  dans un environnement de  $\text{GN}_2$  avec l'utilisation de plusieurs équations d'état de gaz réel nous a permis de conclure que les équations d'état Aungier-Redlich-Kwong (ARK) et Soave-Redlich-Kwong (SRK) ont une meilleure prédiction de de masse volumique telle que fournie par les expériences de Mayer et al. [12]. Ainsi l'influence significative du transfert de chaleur des parois de l'injecteur vers le fluide interne sur la distribution de la masse volumique et la dynamique globale de l'écoulement. De plus la simulation non réactive du couple cryogénique  $\text{LO}_2/\text{GH}_2$  et la comparaison aux résultats numérique de validation confirme que l'utilisation des équations d'états de type gaz réel est indispensable en cas non réactif. Une loi de comportement de type gaz parfait sous-estime la masse volumique trouvé par les EoS ARK et SRK de 77%. Aussi la dynamique de l'écoulement a été en bonne accord avec les résultats HBMS [161]. Le calcul numérique du cas réactif suivant le cas de test RCM3-A60 du couple  $\text{O}_2/\text{H}_2$  avec les modèles de combustion en chimie tabulée PDF (fonction de probabilité de densité) et FLT (Flammelettes) a été effectué avec lois de comportement de type gaz parfait. Les résultats du champ de température et du radical hydroxyle OH ont été proche aux celles trouvés par les études avec flammelettes en gaz réel. Vu que les résultats trouvés par l'étude de combustion du couple  $\text{H}_2/\text{O}_2$  avec le modèle EDM (section 3.6.1.D) étaient pratiquement identiques aux résultats des auteurs [101, 102], ainsi que ce modèle ne tient en compte que la turbulence, a été exclue de présentation dans ce présent chapitre. En générale par rapport aux résultats expérimentaux disponibles les modèles utilisés PDF et FLT présentent un comportement acceptable dans les mêmes conditions supercritiques.

## **Conclusions et perspectives**

## Conclusions et perspectives

Ce travail de thèse visait à développer une méthodologie robuste pour les prédictions de la combustion et le transfert de chaleur dans le contexte du moteur-fusée cryogénique supercritique. Les conditions de fonctionnement extrêmes inhérentes aux applications de fusées et l'interaction complexe entre différentes physiques nécessitent une modélisation minutieuse de tous les phénomènes en jeu dans de telles chambres de combustion : atomisation par jet de liquide, transfert thermiques des parois vers le jet et flux non-réactif et réactif turbulent. Une meilleure compréhension des exigences de modélisation pour l'injection cryogénique dans des conditions trans- et supercritiques est obtenue au moyen de simulations cohérentes.

L'examen d'une configuration réduite de laboratoire (chambre Mascotte) avec des conditions d'injection imposées, a révélé que la nature *a priori* diphasique de l'écoulement (oxygène liquide, hydrogène gazeux) tendait vers une structure homogène où la phase liquide ne pouvait coexister du moment que le mélange ait atteint ou dépassé son point critique, et ce à cause de l'annulation de la tension de surface et de la chaleur latente de vaporisation de l'oxygène liquide. Par un calcul approximatif des nombres et temps caractéristiques de l'écoulement pour les couples cryogénique LOx/GH<sub>2</sub> et LN<sub>2</sub>/GN<sub>2</sub>, nous avons montré que le temps de formation des gouttes était long et que même si des gouttes liquides pouvaient exister, elles seraient très instables et se vaporiseraient en un temps très court. Il était donc justifié de faire appel à l'un des modèles se basant sur les notions de spray à phases homogènes (Eulérien) et que le recours aux méthodes de suivis Lagrangiens, serait aberrant pour une telle configuration, du point de vue du calcul numérique.

Sur la base de l'analyse thermodynamique, les équations d'état Aungier-Redlich-Kwong (ARK) et Soave-Redlich-Kwong (SRK) ont permis une meilleure prédiction de la valeur de la masse volumique cible ( $\rho^*$ ) du N<sub>2</sub> telle que fournie par les expériences alors que l'équation d'état de Peng-Robinson (PR) a surestimé cette valeur de 10%. De même pour le couple LOx/GH<sub>2</sub>, les équations SRK et ARK affichent une bonne prédiction de la masse volumique au point d'injection RCM3-A60 contrairement à l'équation d'état PR. Cet écart entre les EoS se manifeste également à basse température. Une loi de mélange de type Van Der Waals donnée par Clifford [24] a montré une très bonne prédiction de la masse volumique du mélange en fonction de la température et la fraction molaire du mélange O<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>.

Dans la simulation numérique du cas LN<sub>2</sub>/GN<sub>2</sub>, l'azote cryogénique a été injecté dans une chambre à température ambiante. Plusieurs équations d'état (ARK, SRK et PR) ont été utilisées pour cette application de gaz réel. Un calcul RANS a été effectué pour le cas de test réaliste (cas n°3) de Mayer et al. [12] à la lumière des déclarations thermodynamiques. Premièrement, la condition limite adiabatique couramment utilisée pour la paroi de l'injecteur a été prise en compte dans le calcul numérique. La distribution de masse volumique sur l'axe a montré une différence relative jusqu'à 36% par rapport aux valeurs de l'expérience. Un calcul d'injecteur isotherme a donc été adopté pour tenir compte du transfert

de chaleur de la paroi vers le fluide à l'intérieur de l'injecteur. Dans ce cas, la courbe de masse volumique le long de l'axe de la chambre a révélé un bon accord avec les expériences. La comparaison des contours de la masse volumique sur la longueur de l'injecteur et en aval dans la région de la chambre, a mis en évidence que le cœur dense se termine avant d'entrer dans la chambre dans l'injecteur isotherme alors qu'il atteint la position axiale  $X/d = 9,1$  en aval de la sortie de l'injecteur dans le cas adiabatique. En aval de la sortie de l'injecteur, un critère basé sur un seuil relatif de 10% pour la masse volumique sur l'axe a été proposé. Par conséquent, les valeurs de cœur dense calculées pour les cas des injecteurs adiabatiques et isothermes sont assez proches de celles fournies par les modèles empiriques.

Au vu des résultats obtenus, le transfert de chaleur interne dans l'injecteur semble avoir un effet significatif sur la distribution de la masse volumique du jet et donc sur la dynamique globale de l'écoulement. Les techniques de refroidissement des têtes d'injection doivent tenir compte de l'effet de l'apport de chaleur interne sur la masse volumique du propergol liquide et également sur le rapport de mélange à l'entrée de la chambre de combustion.

Dans le calcul RANS du cas non réactif du couple LOx/GH<sub>2</sub>, l'analyse des résultats a montré une l'importance de l'utilisation de loi de comportement de type gaz réel (EoS) et son effet sur la masse volumique des réactifs, sur la dynamique de l'écoulement et sur le taux de mélange en sortie d'un injecteur coaxial. L'équation des gaz parfait manifeste une importante sous-estimation de 77% pour la masse volumique dans l'injecteur d'oxygène et dans le voisinage de la sortie d'injecteur par rapport aux EoS. Les résultats trouvés par le biais des équations d'état SRK et ARK sont les plus proches aux valeurs numériques de HBMS et celle donnée dans l'International Workshop for Rocket Combustion Modeling Workshop (IWRCM, RCM3-A60). De plus, la distribution de la fraction de mélange sur l'axe central de la chambre de combustion, reproduit bien le jet d'oxygène pur (oxydant) à l'intérieur du canal de l'injecteur ainsi qu'en la région avale à l'injecteur où les EoS de ARK, SRK et PR manifestent pratiquement le même profil le long de l'axe central.

Pour les mêmes conditions d'injection (rapport de mélange, condition aux limites) que l'expérience, les résultats du cas réactif effectué avec les modèles de combustion en chimie tabulée PDF (fonction de probabilité de densité) et FLT (Flammelettes) mettent en concordance qualitative avec les observations expérimentales. Par rapport aux résultats expérimentaux, la flamme des modèles PDF et FLT est un peu plus étiré en avant mais de manière générale, la zone de flamme et l'angle d'expansion (l'épanouissement) correspondent bien à ceux des images LIF du radical hydroxyle OH. Les résultats du champ de température et du radical hydroxyle OH du modèle FLT ont été plus proches aux celles trouvés par les études RANS avec flammelettes en gaz réel qu'avec flammelettes en gaz parfait dans le sens de l'épanouissement du jet et cela est grâce à l'ajustement des constants du modèle de turbulence  $k-\varepsilon$  standard. Dans le sens de la longueur de flamme, les deux modèles de combustion utilisés avec loi de comportement de type gaz parfait ont présenté une surestimation de longueur visible de flamme. Nous croyons que cette longue flamme est due à l'utilisation d'équation des gaz parfait pour l'écoulement et le modèle de combustion.

De futurs calculs CFD avancés et des études expérimentales concises sur les injections trans- et supercritiques sont encore nécessaires pour une compréhension plus large du comportement des écoulements denses. Dans une logique d'analyse fondamentale plus approfondie, il serait intéressant de mener une investigation localisée autour de la zone d'injection (vers 35 à 50 mm de l'injecteur LOX) afin de capter au mieux les zones « froides » de l'écoulement. De plus, sur la base des corrélations à cœur dense, les travaux futurs peuvent traiter des outils de calcul algébriques pour prédire la qualité du mélange de propergols qui est intimement liée à l'efficacité de la combustion, sans recourir aux calculs CFD.

Dans le contexte des futurs calculs réactifs du couple  $O_2/H_2$ , la méthodologie proposée dans ce travail sera améliorée avec l'utilisation des lois de comportement de type gaz réel. Ainsi, il serait intéressant d'utiliser la simulation LES pour mieux capter l'écoulement turbulent. Ceci peut donner une structure de flamme de plus en plus proche à celle de l'expérience.

# **Bibliographie**

## Bibliographie

- [1] ASTRONAUTIX, Virtual Encyclopedia, <http://www.astronautix.com/> [consulté le 15 avril 2020].
- [2] Shimote, W. K. (2016). *Modélisation des phénomènes d'ablation de l'insert d'une tuyère de moteur-fusée à propergol solide. Approche expérimentale et numérique* (Doctoral dissertation).
- [3] [https://en.wikipedia.org/wiki/Tsiolkovsky\\_rocket\\_equation](https://en.wikipedia.org/wiki/Tsiolkovsky_rocket_equation) [consulté le 15 avril 2020].
- [4] Tricot, M. (1996). *Systèmes Propulsifs à Propergols Solides*, 1996, Tome III, Tuyère, Divergent Déployable et Contrôle du Vecteur Poussée.
- [5] Anderson, W. E., & Yang, V. (Eds.). (1995). *Liquid rocket engine combustion instability*. American Institute of Aeronautics and Astronautics.
- [6] Sutton, G. P. (1946). *Rocket propulsion elements: an introduction to the engineering of rockets*. John Wiley & Sons.
- [7] De Benedictis, M. (2007). *Instabilités couplées à haute fréquence dans les moteurs-fusées à ergols liquides: étude du couplage chambre de combustion/système d'alimentation* (Doctoral dissertation).
- [8] Dungan, T. D. (2005). *V-2: a combat history of the first ballistic missile*. Westholme.
- [9] Zaloga, S. (1988). Ballistic Missiles in the Third World: Scud and Beyond. *International Defense Review*, 21, 1427
- [10] Haidn, O. J. (2008). Advanced rocket engines. *Advances on propulsion technology for high-speed aircraft*, 1, 6-1.
- [11] Sirignano, W. A., Delplanque, J. P., Chiang, C. H., & Bhatia, R. (1995). Liquid-propellant droplet vaporization: A rate-controlling process for combustion instability. *Liquid rocket engine combustion instability*(A 96-11301 01-20), Washington, DC, American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc.(*Progress in Astronautics and Aeronautics.*, 169, 307-343.
- [12] Taieb, D. (2010). *Simulation numérique des écoulements turbulents dans les canaux de refroidissements: application aux moteurs-fusées* (Doctoral dissertation, Rouen, INSA).
- [13] Le Touze, C. (2015). *Couplage entre modèles diphasiques à «phases séparées» et à «phase dispersée» pour la simulation de l'atomisation primaire en combustion cryotechnique* (Doctoral dissertation).
- [14] [https://fr.wikipedia.org/wiki/Vinci\\_\(moteur-fus%C3%A9e\)](https://fr.wikipedia.org/wiki/Vinci_(moteur-fus%C3%A9e)) [consulté le 15 avril 2020].
- [15] SNECMA. site internet : <https://www.safran-aircraft-engines.com/>. [consulté le 15 avril 2020].
- [16] Gaillard, P. (2015). *Interfaces diffuses et flammes transcritiques LOX/H2* (Doctoral dissertation, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI).
- [17] De Castro, M. D. L., Valcárcel, M., & Tena, M. T. (2012). *Analytical supercritical fluid extraction*. Springer Science & Business Media.

- [18] Hirschfelder, J. O., Curtiss, C. F., Bird, R. B., & Mayer, M. G. (1964). *Molecular theory of gases and liquids* (Vol. 165). New York: Wiley.
- [19] Banuti, D. T., Hannemann, V., Hannemann, K., & Weigand, B. (2016). An efficient multi-fluid-mixing model for real gas reacting flows in liquid propellant rocket engines. *Combustion and Flame*, 168, 98-112.
- [20] Oefelein, J. C., & Yang, V. (1998). Modeling high-pressure mixing and combustion processes in liquid rocket engines. *Journal of Propulsion and Power*, 14(5), 843-857.
- [21] Petit, X. (2014). *Etude de l'interaction cinétique chimique/turbulence dans une flamme cryotechnique LOx/CHA4* (Doctoral dissertation, Rouen, INSA).
- [22] Pitzer, K. S. (1955). The volumetric and thermodynamic properties of fluids. I. Theoretical basis and virial coefficients<sup>1</sup>. *Journal of the American Chemical Society*, 77(13), 3427-3433.
- [23] Reid, R. C. (1987). J. M. Prausnitz, and BE Poling. *The Properties of Gases and Liquids*, 4, 450-575.
- [24] Clifford, A., & Clifford, T. (1999). *Fundamentals of supercritical fluids*. Oxford University Press.
- [25] Tripathi, A. (2001). *Structure des flammes cryotechniques à haute pression* (Doctoral dissertation, Châtenay-Malabry, Ecole centrale de Paris).
- [26] Equipe, C. F. D. (2005). VERS LA SIMULATION AUX GRANDES ECHELLES DE LA COMBUSTION SUPERCRITIQUE.
- [27] J. Bellan. Theory, modeling and analysis of turbulent supercritical mixing. *Combust. Sci. Tech.*, 178 :253–281, 2006.
- [28] Bellan, J. (2006). Theory, modeling and analysis of turbulent supercritical mixing. *Combustion science and technology*, 178(1-3), 253-281.
- [29] Oschwald, M., Smith, J. J., Branam, R., Hussong, J., Schik, A., Chehroudi, B., & Talley, D. (2006). Injection of fluids into supercritical environments. *Combustion Science and Technology*, 178(1-3), 49-100.
- [30] Oschwald, M. (2002). Spreading angle and centerline variation of density of supercritical nitrogen jets. *Atomization and Sprays*, 12(1-3).
- [31] Hopfinger, E. (2001). Combustion dans les moteurs fusées. In *Acte du Colloque de Synthèse du Groupe de Recherche CNES/CNRS/ONERA/SNECMA* (pp. 34-47).
- [32] CANDEL\*, S., Juniper, M., Singla, G., Scouflaire, P., & Rolon, C. (2006). Structure and dynamics of cryogenic flames at supercritical pressure. *Combustion Science and Technology*, 178(1-3), 161-192.
- [33] Singla, G., Scouflaire, P., Rolon, C., & Candel, S. (2005). Transcritical oxygen/transcritical or supercritical methane combustion. *Proceedings of the combustion institute*, 30(2), 2921-2928.
- [34] Haidn, O. J. (1998). Flow visualization of interacting cryogenic coaxial jets. In *Proc. of the 14th ILASS Europe Conference* (pp. 602-608).

- [35] Hardi, J. S., Martinez, H. C. G., Oschwald, M., & Dally, B. B. (2014). LOx jet atomization under transverse acoustic oscillations. *Journal of propulsion and power*, 30(2), 337-349.
- [36] Perakis, N., Celano, M. P., & Haidn, O. J. (2017). Heat flux and temperature evaluation in a rectangular multi-element GOX/GCH4 combustion chamber using an inverse heat conduction method. In *7th European Conference for Aerospace Sciences*.
- [37] Chehroudi, B., Cohn, R., & Talley, D. (2002). 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.
- [38] Mayer, W., & Smith, J. J. (2004). Fundamentals of supercritical mixing and combustion of cryogenic propellants. *Liquid Rocket Thrust Chambers: Aspect of Modeling, Analysis, and Design, Progress in Astronautics and Aeronautics*, 200, 339-368.
- [39] Mayer, W., Telaar, J., Branam, R., Schneider, G., & Hussong, J. (2003). Raman measurements of cryogenic injection at supercritical pressure. *Heat and Mass Transfer*, 39(8-9), 709-719.
- [40] Chehroudi, B., Cohn, R., Talley, D., & Badakhshan, A. (2000, July). Raman scattering measurements in the initial region of sub-and supercritical jets. In *36th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference and Exhibit* (p. 3392).
- [41] Oschwald, M., & Schik, A. (1999). Supercritical nitrogen free jet investigated by spontaneous Raman scattering. *Experiments in Fluids*, 27(6), 497-506.
- [42] Branam, R., & Mayer, W. (2003). Characterization of cryogenic injection at supercritical pressure. *Journal of Propulsion and power*, 19(3), 342-355.
- [43] Harsha, P. T. (1971). *Free turbulent mixing: a critical evaluation of theory and experiment* (No. ARO-ETF-TR-70-273). ARO INC ARNOLD AFS TN.
- [44] Prausnitz, J. M., Lichtenthaler, R. N., & De Azevedo, E. G. (1998). *Molecular thermodynamics of fluid-phase equilibria*. Pearson Education.
- [45] Bellan, J. (2000). Supercritical (and subcritical) fluid behavior and modeling: drops, streams, shear and mixing layers, jets and sprays. *Progress in energy and combustion science*, 26(4-6), 329-366.
- [46] Mayer, W., Labani, R., & Krülle, G. (1992). Theoretical investigations of droplet flow under typical coaxial injector flow conditions in cryogenic rocket engines. In *28th Joint Propulsion Conference and Exhibit* (p. 3121).
- [47] Harstad, K., & Bellan, J. (1998). Isolated fluid oxygen drop behavior in fluid hydrogen at rocket chamber pressures. *International journal of heat and mass transfer*, 41(22), 3537-3550.
- [48] Anderson, T., Winter, M., & Haas, M. (1994). Observation of a droplet/shock interaction in a supercritical environment. In *32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (p. 557).
- [49] Savery, C. W. (1969). Experimental studies of the vaporization of droplets in heated air at high pressures.

- [50] Sato, J. (1993, January). Studies on droplet evaporation and combustion in high pressures. In *31st Aerospace Sciences Meeting* (p. 813).
- [51] Morin, C., Chauveau, C., & Gökalp, I. (1999, July). Studies on the influence of pressure and temperature on the vaporization of n-heptane droplets. In *15th Annual Conference on Liquid Atomisation and Spray Systems, Toulouse, France*.
- [52] Chesneau, X., Chauveau, C., & Gokalp, I. (1994). Experiments on high pressure vaporization of liquid oxygen droplets. In *32nd Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (p. 688).
- [53] Krulle, G., Mayer, W. (1994) *Injection, atomization and mixing of propellants in liquid rocket engines using coaxial injectors*, Proceeding de la Conférence sur les Liquides, Atomisation et Sprays (ICLASS), Rouen, France.
- [54] Birk, A., McQuaid, M., & Bliesener, G. (1992). *Reacting Liquid Monopropellant Sprays-Experiments with High Velocity Full Cone Sprays in 33 MPa, 500 Degrees C Nitrogen*. ARMY RESEARCH LAB ABERDEEN PROVING GROUND MD.
- [55] Mayer, W., & Tamura, H. (1996). Propellant injection in a liquid oxygen/gaseous hydrogen rocket engine. *Journal of Propulsion and Power*, 12(6), 1137-1147.
- [56] Singla, G., Scouflaire, P., Rolon, C., & Candel, S. (2006). Planar laser-induced fluorescence of OH in high-pressure cryogenic LOx/GH<sub>2</sub> jet flames. *Combustion and Flame*, 144(1-2), 151-169.
- [57] M. Juniper, B. Leroux, F. Lacas and S. Candel. (2001) Stabilization of cryogenic flames and effect of recess, pages 221–231. Cepadues.
- [58] Singla, G., Scouflaire, P., Rolon, J. C., & Candel, S. (2007). Flame stabilization in high pressure LOx/GH<sub>2</sub> and GCH<sub>4</sub> combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2), 2215-2222.
- [59] Juniper, M., Darabiha, N., & Candel, S. (2003). The extinction limits of a hydrogen counterflow diffusion flame above liquid oxygen. *Combustion and flame*, 135(1-2), 87-96.
- [60] Cannevière, K. (2003). *Simulation numérique directe de la combustion turbulente diphasique: application à l'étude de la propagation et de la structure des flammes* (Doctoral dissertation, INSA de Rouen).
- [61] Ivancic, B., Mayer, W., Brueggemann, D., & Kruelle, G. (1999, June). Experimental and numerical investigation of time and length scales in LOX/GH<sub>2</sub>-rocket combustors. In *35th Joint Propulsion Conference and Exhibit* (p. 2211).
- [62] Schetz, J. A., & Harsha, P. T. (1980). *Injection and Mixing in Turbulent Flow* (Progress in Aeronautics and Astronautics, Vol. 68).
- [63] Chehroudi, B., Talley, D., & Coy, E. (1999). Initial growth rate and visual characteristics of a round jet into a sub-to supercritical environment of relevance to rocket, gas turbine, and diesel engines. In *37th Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (p. 206).
- [64] Schlichting, H., & Gersten, K. (2016). *Boundary-layer theory*. Springer. McGraw–Hill, New York, 1979, pp. 729–755.

- [65] Chen, J. H., Choudhary, A., De Supinski, B., DeVries, M., Hawkes, E. R., Klasky, S., ... & Sankaran, R. (2009). Terascale direct numerical simulations of turbulent combustion using S3D. *Computational Science & Discovery*, 2(1), 015001.
- [66] Miller, R. S., Harstad, K. G., & Bellan, J. (2001). Direct numerical simulations of supercritical fluid mixing layers applied to heptane–nitrogen. *Journal of Fluid Mechanics*, 436, 1-39.
- [67] Oefelein, J. C. (2006). Mixing and combustion of cryogenic oxygen-hydrogen shear-coaxial jet flames at supercritical pressure. *Combustion Science and Technology*, 178(1-3), 229-252.
- [68] Taskinoglu, E. S., & Bellan, J. (2010). A posteriori study using a DNS database describing fluid disintegration and binary-species mixing under supercritical pressure: heptane and nitrogen. *Journal of Fluid Mechanics*, 645, 211.
- [69] Borghesi, G., & Bellan, J. (2015). A priori and a posteriori investigations for developing large eddy simulations of multi-species turbulent mixing under high-pressure conditions. *Physics of Fluids*, 27(3), 035117.
- [70] Ruiz, A. M., Lacaze, G., Oefelein, J. C., Mari, R., Cuenot, B., Selle, L., & Poinot, T. (2016). Numerical benchmark for high-Reynolds-number supercritical flows with large density gradients. *AIAA Journal*, 54(5), 1445-1460.
- [71] Sirignano, W. A. (2010). *Fluid dynamics and transport of droplets and sprays*. Cambridge university press.
- [72] Barbeau, B., Jay, S., Lacas, F., & Candel, S. (2001). Simulation numérique de la combustion dans des injecteurs coaxiaux. *Combustion dans les Moteurs Fusees, Actes du Colloque de Synthèse du Groupe de Recherche. CNES*, 31.
- [73] Poschner, M., Zimmermann, I., & Pfitzner, M. (2007). CFDsimulation of the combustion process in the mascotte facility under supercritical conditions. *21stICDERS*.
- [74] Cheng, G. C., & Farmer, R. (2006). Real fluid modeling of multiphase flows in liquid rocket engine combustors. *Journal of propulsion and power*, 22(6), 1373-1381.
- [75] Poschner, M., & Pfitzner, M. (2006). Real Gas CFD Simulation of Supercritical H<sub>2</sub>-LOX in the MASCOTTE Single Injector Combustor Using a Commercial CFD Code. In *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (p. 952).
- [76] Kim, T., Kim, Y., & Kim, S. K. (2011). Numerical analysis of gaseous hydrogen/liquid oxygen flamelet at supercritical pressures. *International journal of hydrogen energy*, 36(10), 6303-6316.
- [77] Urbano, A., Selle, L., Staffelbach, G., Cuenot, B., Schmitt, T., Ducruix, S., & Candel, S. (2016). Exploration of combustion instability triggering using large eddy simulation of a multiple injector liquid rocket engine. *Combustion and Flame*, 169, 129-140.
- [78] Rocchi, J. P. (2014). *Simulations aux grandes échelles de la phase d'allumage dans un moteur fusée cryotechnique* (Doctoral dissertation).
- [79] Mari, R. (2015). *Influence of heat transfer on high pressure flame structure and stabilization in liquid rocket engines* (Doctoral dissertation).

- [80] Schmitt, T., Méry, Y., Boileau, M., & Candel, S. (2011). Large-eddy simulation of oxygen/methane flames under transcritical conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(1), 1383-1390.
- [81] Pohl, S., Jarczyk, M., Pfitzner, M., & Rogg, B. (2013). Real gas CFD simulations of hydrogen/oxygen supercritical combustion. *Progress in propulsion physics*, 4, 583-614.
- [82] Minotti, A., & Bruno, C. (2008). Comparison Between Real and Ideal Sub and Supercritical Combustion Simulations for LO<sub>2</sub>-CH<sub>4</sub> LRE flames at 15MPa. In *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit* (p. 951).
- [83] De Giorgi, M. G., Sciolti, A., & Ficarella, A. (2014). Application and comparison of different combustion models of high pressure LOX/CH<sub>4</sub> jet flames. *Energies*, 7(1), 477-497.
- [84] Vié, A. (2010). *Simulation aux grandes échelles d'écoulements diphasiques turbulents à phase liquide dispersée* (Doctoral dissertation).
- [85] Xia, J., Zhao, H., Megaritis, A., Luo, K. H., Cairns, A., & Ganippa, L. C. (2013). Inert-droplet and combustion effects on turbulence in a diluted diffusion flame. *Combustion and flame*, 160(2), 366-383.
- [86] Chen, J. Y. (2007). A Eulerian PDF scheme for LES of nonpremixed turbulent combustion with second-order accurate mixture fraction. *Combustion Theory and Modelling*, 11(5), 675-695.
- [87] R. Branam, J. Telaar, and W. Mayer. (2001) *Simulation of cryogenic jet injection, RCM 1*. In 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling : Atomization, Combustion and Heat Transfer held in Lampoldshausen, Germany. Defense Technical Information Center.
- [88] Petit, X., Ribert, G., Lartigue, G., & Domingo, P. (2013). Large-eddy simulation of supercritical fluid injection. *The Journal of Supercritical Fluids*, 84, 61-73.
- [89] Hosangadi, A., Lee, C., Kannepalli, C., & Arunajatesan, S. (2008, July). Three-dimensional hybrid RANS/LES simulations of a supercritical liquid nitrogen jet. In *44th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* (p. 5227).
- [90] Kim, T., Kim, Y., & Kim, S. K. (2011). Numerical study of cryogenic liquid nitrogen jets at supercritical pressures. *The Journal of Supercritical Fluids*, 56(2), 152-163.
- [91] Kim, T., Kim, Y., & Kim, S. K. (2011). Real-fluid flamelet modeling for gaseous hydrogen/cryogenic liquid oxygen jet flames at supercritical pressure. *The Journal of Supercritical Fluids*, 58(2), 254-262.
- [92] Banuti, D., & Hannemann, K. (2010). Effect of injector wall heat flux on cryogenic injection. In *46th AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit* (p. 7139).
- [93] Banuti, D. T., & Hannemann, K. (2016). The absence of a dense potential core in supercritical injection: A thermal break-up mechanism. *Physics of Fluids*, 28(3), 035103.
- [94] Müller, H., Niedermeier, C. A., Matheis, J., Pfitzner, M., & Hickel, S. (2016). Large-eddy simulation of nitrogen injection at trans-and supercritical conditions. *Physics of fluids*, 28(1), 015102.

- [95] Ruiz, A. (2012). *Simulations numériques instationnaires de la combustion turbulente et transcritique dans les moteurs cryotechniques* (Doctoral dissertation, Ph. D. thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse-INPT).
- [96] Schmitt, T., Selle, L., Ruiz, A., & Cuenot, B. (2010). Large-eddy simulation of supercritical-pressure round jets. *AIAA journal*, 48(9), 2133-2144.
- [97] Ribert, G., Zong, N., Yang, V., Pons, L., Darabiha, N., & Candel, S. (2008). Counterflow diffusion flames of general fluids: Oxygen/hydrogen mixtures. *Combustion and Flame*, 154(3), 319-330.
- [98] Giovangigli, V., Matuszewski, L., & Dupoirieux, F. (2011). Detailed modeling of planar transcritical H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub>-N<sub>2</sub> flames. *Combustion Theory and Modelling*, 15(2), 141-182.
- [99] Lacaze, G., & Oefelein, J. C. (2012). A non-premixed combustion model based on flame structure analysis at supercritical pressures. *Combustion and Flame*, 159(6), 2087-2103.
- [100] Juanós, A. J., & Sirignano, W. A. (2017). Pressure effects on real-gas laminar counterflow. *Combustion and Flame*, 181, 54-70.
- [101] Benarous, A., & Liazid, A. (2009). H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> Supercritical combustion modeling using a CFD code. *Thermal Science*, 13(3), 139-152.
- [102] Benmansour, A., Liazid, A., Logerais, P. O., & Durastanti, J. F. (2016). A 3D numerical study of LO 2/GH 2 supercritical combustion in the ONERA-Mascotte Test-rig configuration. *Journal of Thermal Science*, 25(1), 97-108.
- [103] Candel, S., Herding, G., Synder, R., Scouflaire, P., Rolon, C., Vingert, L., ... & Stepowski, D. (1998). Experimental investigation of shear coaxial cryogenic jet flames. *Journal of propulsion and power*, 14(5), 826-834.
- [104] Demoulin, F. X., Zurbach, S., & Mura, A. (2009). High-pressure supercritical turbulent cryogenic injection and combustion: A single-phase flow modeling proposal. *Journal of propulsion and power*, 25(2), 452-464.
- [105] Oefelin, J. C., & Yang, V. (1996). Simulation of high-pressure spray field dynamics. *Recent advances in spray combustion: Spray combustion measurements and model simulation.*, 2, 263-304.
- [106] Yang, V. (2000). Modeling of supercritical vaporization, mixing, and combustion processes in liquid-fueled propulsion systems. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1), 925-942.
- [107] Ribert, G., Domingo, P., Petit, X., Vallee, N., & Blaisot, J. B. (2020). Modelling and Simulations of High-Pressure Practical Flows. *High Pressure Flows for Propulsion Applications*, 629-676.
- [108] Gicquel, O., Darabiha, N., & Thévenin, D. (2000). Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2), 1901-1908.

- [109] Ribert, G., Domingo, P., & Vervisch, L. (2019). Analysis of sub-grid scale modeling of the ideal-gas equation of state in hydrogen–oxygen premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 37(2), 2345-2351.
- [110] Ribert, G., Petit, X., & Domingo, P. (2017). High-pressure methane-oxygen flames. Analysis of sub-grid scale contributions in filtered equations of state. *The Journal of Supercritical Fluids*, 121, 78-88.
- [111] Dauplain, A. (2006). *Allumage des moteurs fusées cryotechniques* (Doctoral dissertation).
- [112] Borghi, R., & Champion, M. (2000). *Modélisation et théorie des flammes*. Editions Technip.
- [113] Benarous, A., Liazid, A., & Karmed, D. (2007). H<sub>2</sub>/O<sub>2</sub> combustion under supercritical conditions. In *Third European combustion meeting, Crete, Grèce*.
- [114] Pope, S. B. (1978). An explanation of the turbulent round-jet/plane-jet anomaly. *AIAA journal*, 16(3), 279-281.
- [115] \*\*\*, [ANSYS FLUENT 12.0 Theory Guide](https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/node1.htm), Release 12.0 © ANSYS, Inc. 2009-01-23, <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/th/node1.htm> [consulté le 28 mai 2020].
- [116] Jones, W., & Whitelaw, J. H. (1982). Calculation methods for reacting turbulent flows: a review. *Combustion and flame*, 48, 1-26.
- [117] d'Avogadro, L., de Gay-Lussac, L., & de Charles, L. B. 1. Compléments sur la théorie cinétique et le modèle du gaz parfait.
- [118] Soave, G. (1972). Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state. *Chemical engineering science*, 27(6), 1197-1203.
- [119] Xavier JOULIA, “ COURS THERMO II 1A GPI – GI –GC”, V.1.3 - Février 2008.
- [120] Mathias, P. M., & Copeman, T. W. (1983). Extension of the Peng-Robinson equation of state to complex mixtures: evaluation of the various forms of the local composition concept. *Fluid Phase Equilibria*, 13, 91-108.
- [121] Peng, D. Y., & Robinson, D. B. (1976). A new two-constant equation of state. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15(1), 59-64.
- [122] Aungier, R.H. (1995). A Fast, Accurate Real Gas Equation of State for Fluid Dynamic Analysis Applications, *Journal of Fluids Engineering* 117, pp. 277-281.
- [123] Kim, S. K., Choi, H. S., & Kim, Y. (2012). Thermodynamic modeling based on a generalized cubic equation of state for kerosene/LOx rocket combustion. *Combustion and flame*, 159(3), 1351-1365.
- [124] Bensalem, C., Benarous, A., & Karmed, D. (2017). Vers la caractérisation du mélange en sortie d'un injecteur coaxial cryotechnique: Effet de la loi de comportement. In *Congrès français de mécanique*. AFM, Association Française de Mécanique.
- [125] Plateau, J. (1873). *Statique expérimentale et théorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires* (Vol. 2). Gauthier-Villars.

- [126] Rayleigh, L. (1879). On the capillary phenomena of jets. *Proc. R. Soc. London*, 29(196-199), 71-97.
- [127] Mossa, J. B. (2005). *Extension polydisperse pour la description Euler-Euler des écoulements diphasiques réactifs* (Doctoral dissertation).
- [128] Benarous A. (2010). Simulation numérique de la combustion stationnaire dans un moteur fusée, Thèse de Doctorat Sciences en Mécanique, Université des Sciences et de la Technologie-Mohamed Boudiaf, Oran, Algérie.
- [129] Villermaux, E. (1998). Mixing and spray formation in coaxial jets. *Journal of propulsion and power*, 14(5), 807-817.
- [130] Faeth, G. M. (1991). Structure and atomization properties of dense turbulent sprays. In *Symposium (International) on Combustion* (Vol. 23, No. 1, pp. 1345-1352). Elsevier.
- [131] Baumgarten, C. (2006). *Mixture formation in internal combustion engines*. Springer Science & Business Media.
- [132] Omer, K., & Ashgriz, N. (2011). Spray nozzles. In *Handbook of Atomization and Sprays* (pp. 497-579). Springer, Boston, MA.
- [133] Karasawa, T., Tanaka, M., Abe, K., Shiga, S., & Kurabayashi, T. (1992). Effect of nozzle configuration on the atomization of a steady spray. *Atomization and Sprays*, 2(4).
- [134] Fath, A., Fettes, C., & Leipertz, A. (1998). Investigation of the diesel spray break-up close to the nozzle at different injection conditions. In *The fourth international symposium COMODIA* (Vol. 98, pp. 429-433).
- [135] Mashayek, F., & Pandya, R. V. R. (2003). Analytical description of particle/droplet-laden turbulent flows. *Progress in energy and combustion science*, 29(4), 329-378.
- [136] Pilch, M., & Erdman, C. A. (1987). Use of breakup time data and velocity history data to predict the maximum size of stable fragments for acceleration-induced breakup of a liquid drop. *International journal of multiphase flow*, 13(6), 741-757.
- [137] Shraiber, A. A., Podvysotsky, A. M., & Dubrovsky, V. V. (1996). Deformation and breakup of drops by aerodynamic forces. *Atomization and Sprays*, 6(6).
- [138] Gelfand, B. E. (1996). Droplet breakup phenomena in flows with velocity lag. *Progress in energy and combustion science*, 22(3), 201-265.
- [139] Faeth, G. M. (1983). Evaporation and combustion of sprays. *Progress in Energy and Combustion Science*, 9(1-2), 1-76.
- [140] Williams, A. (1973). Combustion of droplets of liquid fuels: a review. *Combustion and flame*, 21(1), 1-31.
- [141] Kuo, K. K. (2005). *Principles of combustion* (No. TJ254. 5 K85 2005).
- [142] Law, C. K., & Law, H. K. (1977). Theory of quasi-steady one-dimensional diffusional combustion with variable properties including distinct binary diffusion coefficients. *Combustion and Flame*, 29, 269-275.

- [143] Lamanna, G., Sun, H., Weigand, B., Magatti, D., Micciché, P., & Ferri, F. (2004). On the Evaporation of a Monodisperse Droplet Stream at High-Pressure. Proceeding du XXI<sup>ème</sup> Congrès Internationale sur la Mécanique Théorique et Appliquée (ICTAM), 2004, Varsovie, Pologne.
- [144] Benmansour, A. Etude de la combustion en régime supercritique, Thèse de Doctorat en Génie Mécanique, Ecole Nationale Polytechnique d'Oran, Algérie, 2016.
- [145] Sainte-Rose, B. (2010). *Simulations numériques d'écoulements réactifs massivement décollés par une approche hybride RANS/LES* (Doctoral dissertation, Châtenay-Malabry, Ecole centrale de Paris).
- [146] Cuenot, B., & Poinso, T. (1994, January). Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. Implications for turbulent diffusion combustion. In *Symposium (International) on Combustion* (Vol. 25, No. 1, pp. 1383-1390). Elsevier.
- [147] Gordon, S., & McBride, B. J. (1994). Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions and applications. Part 1: Analysis. NASA Reference Publication No.1311, Lewis Research Center, 1994, Ohio, USA.
- [148] Giovangigli, V., & Smooke, M. D. (1987). Extinction of strained premixed laminar flames with complex chemistry. *Combustion science and technology*, 53(1), 23-49.
- [149] DESHAIES, B., & SABEL'NIKOV, V. (2002). Combustion en écoulement supersonique. Turbulence. Applications. *Techniques de l'ingénieur. Génie énergétique*, 2(BE8341), BE8341-1.
- [150] Poinso, T., & Veynante, D. (2005). *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc.
- [151] Bray, K. N. C. (1994). Laminar flamelets in turbulent flames. *Turbulent reacting flows*. pages 63-114.
- [152] Liew, S. K., Bray, K. N. C., & Moss, J. B. (1981). A flamelet model of turbulent non-premixed combustion. *Combustion Science and Technology*, 27(1-2), 69-73.
- [153] Dixon-Lewis, G. (1991, January). Structure of laminar flames. In *Symposium (International) on Combustion* (Vol. 23, No. 1, pp. 305-324). Elsevier.
- [154] Peters, N. (1984). Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in energy and combustion science*, 10(3), 319-339.
- [155] Rodi, W., & Spalding, D. B. (1970). A two-parameter model of turbulence, and its application to free jets. *Wärme-und Stoffübertragung*, 3(2), 85-95.
- [156] Haiden, O. J. (2001). *2ND International Workshop on Rocket Combustion Modeling: Atomization, Combustion and Heat Transfer held in Lampoldshausen, Germany on 25-27 Mar 2001*. GERMAN AEROSPACE CENTER LAMPOLDSHAUSEN (GERMANY).
- [157] Mayer, W. O. H., Schik, A. H. A., Vielle, B., & Chauveau, C. (1998). G-ogravekalp, I.; Talley, DG; Woodward, RD Atomization and Breakup of Cryogenic Propellants Under High-Pressure Subcritical and Supercritical Conditions. *J. Propuls. Power*, 14, 835-842.
- [158] National Institute of Standards and Technology, <https://webbook.nist.gov/chemistry/fluid/>.  
[consulté le 08 août 2020]

- [159] Oefelein, J. C. (2005). Thermophysical characteristics of shear-coaxial LOX–H<sub>2</sub> flames at supercritical pressure. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(2), 2929-2937.
- [160] Bensalem, C., Fekaoui, M.F., & Benarous, A. (2017). *Modélisation de la Dynamique d'un Jet d'Azote Liquide (LN<sub>2</sub>) en Régime Supercritique*, Le 4ème Séminaire sur les Technologies Mécaniques Avancées, 14 et 15 Novembre 2017, Tlemcen, Algérie.
- [161] Farmer, R., Cheng, G., Chen, Y. S., & Garcia, R. (2001). CFD simulation of liquid rocket engine injectors, *Proceedings*, Second (2nd) International Workshop on Rocket Combustion Modeling, Lampoldshausen, Germany, 2001.
- [162] Bensalem, C., Benarous, A., & Logerais, P. O. (2020). Numerical analysis of the flow dynamics of an N<sub>2</sub> cryogenic jet. *Thermal Science*, (00), 162-162.
- [163] Schmitt, T., Selle, L., Cuenot, B., & Poinso, T. (2009). Large-eddy simulation of transcritical flows. *Comptes Rendus Mécanique*, 337(6-7), 528-538.
- [164] Banuti, D., Raju, M., Ma, P. C., Ihme, M., & Hickey, J. P. (2017). Seven questions about supercritical fluids-towards a new fluid state diagram. In *55th AIAA Aerospace Sciences Meeting* (p. 1106).
- [165] Ó Conaire, M., Curran, H. J., Simmie, J. M., Pitz, W. J., & Westbrook, C. K. (2004). A comprehensive modeling study of hydrogen oxidation. *International journal of chemical kinetics*, 36(11), 603-622.
- [166] Haidn, O. J., & Habiballah, M. (2003). Research on high pressure cryogenic combustion. *Aerospace Science and Technology*, 7(6), 473-491.
- [167] Kitsche, W. (2010). *Operation of a Cryogenic Rocket Engine: An Outline with Down-to-Earth and Up-to-Space Remarks*. Springer Science & Business Media.
- [168] Habiballah, M., Vingert, L., Traineau, J. C., & Vuillermoz, P. (1997). MASCOTTE: a test bench for cryogenic combustion research. OFFICE NATIONAL D'ETUDES ET DE RECHERCHES AEROSPATIALES ONERA-PUBLICATIONS-TP.
- [169] Institute of Space Propulsion Lampoldshausen. Test benches status report. DLR, 2011. [https://www.dlr.de/ra/Portaldata/55/Resources/dokumente/2017/Institute\\_of\\_Space\\_Propulsion\\_-\\_Status\\_Report\\_2017.pdf](https://www.dlr.de/ra/Portaldata/55/Resources/dokumente/2017/Institute_of_Space_Propulsion_-_Status_Report_2017.pdf) [consulté le 08 août 2020]
- [170] Iannetti, A. (2016). *Méthodes de diagnostic pour les moteurs de fusée à ergols liquides* (Doctoral dissertation).
- [171] E. Perez. Ariane5 user manual. (2001). [https://www.arianespace.com/wp-content/uploads/2015/09/Ariane5\\_users\\_manual\\_Issue5\\_July2011.pdf](https://www.arianespace.com/wp-content/uploads/2015/09/Ariane5_users_manual_Issue5_July2011.pdf) [consulté le 08 août 2020]
- [172] Vingert, L., Ordonneau, G., Fdida, N., & Grenard, P. (2016). A rocket engine under a magnifying glass.
- [173] Vingert, L. (2006). Sélection de cas tests Mascotte:–cas subcritique LO<sub>x</sub>/GH<sub>2</sub> 10 bar.–cas supercritique LO<sub>x</sub>/GH<sub>2</sub> 60 bar. *Rapport technique RT, 1*, 11785.

# **Annexe A**

## Annexe A : Bancs d'essai

### 1. Les bancs d'essai

Les moteurs sont testés sur des bancs d'essai soit pendant la phase de développement, soit pendant la production pour la réception du moteur (essai permettant l'acceptation du moteur pour le vol et son réglage final). Des exemples des bancs moteurs sont le PF50 à Vernon, le P5 (figure A.1) et le P4.1 au DLR [167]. Des bancs d'essai sous-systèmes existent également afin d'effectuer l'analyse des nouveaux concepts sous-systèmes et pour le recalage des modèles de prévision. Des exemples sont les bancs Mascotte à l'ONERA (Fig. A.2) [168] et les bancs P1 à P8 au DLR [169].

Un banc d'essai est un système complexe avec des réservoirs cryogéniques et des interfaces visant à reproduire l'environnement du moteur sur le lanceur. La gestion du moteur à travers l'activation des vannes, des redlines et des séquences d'arrêt est effectuée par l'ordinateur de contrôle du banc. En particulier, le fonctionnement au banc permet, dans certains cas, un pilotage en boucle fermée du moteur/sous-système. Un exemple notable est le pilotage du moteur Vulcain 2 en boucle fermée au banc PF50 ou P5 au DLR [167]. Le système de surveillance des bancs est basé sur des seuils fixes prédéterminés. Le nombre des seuils (*redlines*) varie selon l'application. Lorsqu'une redline est dépassée, un arrêt moteur selon une séquence préprogrammée est réalisé. Un travail important basé sur les modèles de prévision et l'analyse des cas de pannes redoutés est effectuée avant chaque essai afin de choisir les valeurs des seuils de redlines et vérifier la compatibilité avec les points de fonctionnement préconisés [170].

La gestion des surveillances pendant une campagne d'essai est une tâche complexe du fait que les objectifs de programmes obligent à faire un nombre maximum d'essais à différents points de fonctionnement. Selon les points visés, il faut donc veiller à garantir des marges suffisantes vis à vis des seuils redlines pour ne pas arrêter des tirs à feu prématurément. En vol, sur le lanceur Ariane 5 par exemple, la gestion des redlines est plus simple parce que le point de fonctionnement moteur est toujours le même [171].

Cette problématique fut identifiée assez tôt dans le développement du SSME. Ce moteur réutilisable devait être extensivement testé au sol sur le banc d'essai pour établir l'aptitude du système à se rallumer en vol. Au banc d'essai, l'ordinateur de contrôle, qui est une copie exacte de l'ordinateur de vol, acquiert et traite en temps réel environ 500 mesures et gère le pilotage de l'essai. Suite à plusieurs cas de panne et aux coûts d'analyse associés aux premières versions des algorithmes de contrôle moteur, la NASA a lancé, à partir des années 80, plusieurs campagnes d'amélioration de ces systèmes visant, entre autre, à l'automatisation des surveillances par redlines [170].



Figure A.1 Banc P5 au DLR [170]



Figure A.2 Banc Mascotte [170]

### 1.1. Le banc d'essai M51

L'installation d'injection cryogénique M51 du DLR est utilisée pour étudier la désintégration et le mélange des jets cryogéniques dans des conditions de haute pression. La recherche est centrée sur les processus d'injection et de mélange dans les moteurs de fusées cryogéniques avec LOX (oxygène liquide) et  $\text{GH}_2$  (hydrogène liquide) comme propergols. Pour étudier les processus fondamentaux de l'injection haute pression, les propergols sont remplacés par des fluides de simulation non réactifs. Dans le cas de test proposé RCM1 [156],  $\text{LN}_2$  (azote liquide froid) est injecté dans un environnement d'azote gazeux chaud. Le jet  $\text{LN}_2$  est constitué d'un simple injecteur tubulaire d'un diamètre intérieur de 2,2 mm. L'expérience sur l'injection par flux froid a pour objectif principal de comprendre le processus de mélange d'un jet cryogénique dense dans un environnement de gaz léger.

La photographie "Shadowgraph" est utilisée pour une évaluation préliminaire du champ d'écoulement. Les profils de densité du jet sont mesurés à l'aide de diagnostics de diffusion Raman bidimensionnels.

La chambre d'essai M51 est constituée d'un récipient cylindrique d'un diamètre intérieur de 122 mm. La longueur réelle de la chambre est de 1000 mm (figure A.3a). La chambre de test dispose de 4 fenêtres pour l'accès optique. L'injecteur est monté au centre de la plaque frontale. La plaque frontale a une fente annulaire de 5 mm. Le diamètre interne de l'injecteur est de 2,2 mm. La longueur du tube est de 90,0 mm. Étant donné que le rapport longueur / diamètre du tube est supérieur à 40, les parois internes du tube sont hydrauliquement lisses et le collecteur d'injecteur a un diamètre intérieur de 6,0 mm (figure A.3b) [21].

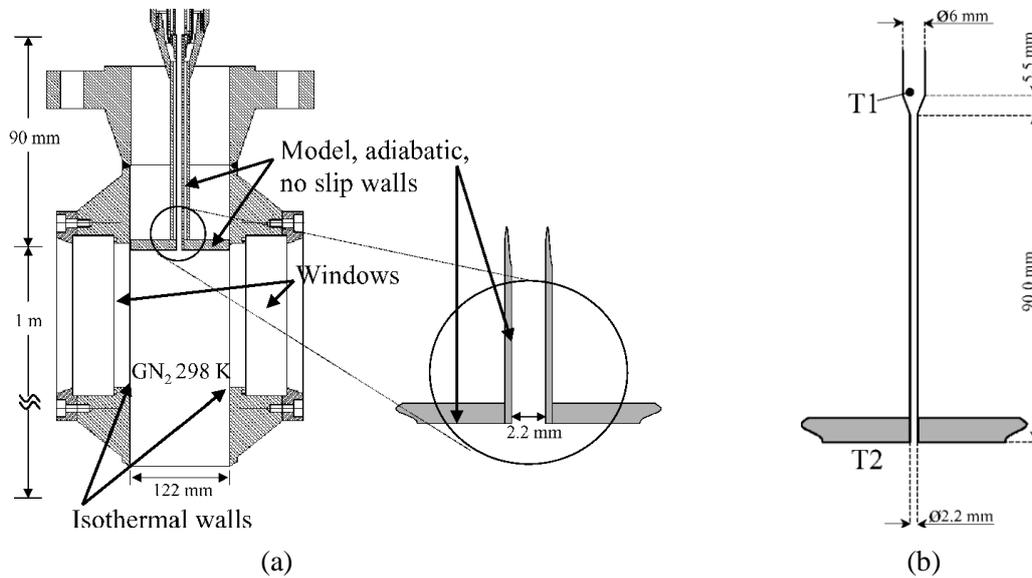


Figure A.3 Banc d'essai M51 (a). Dimensions de l'injecteur (b) [39]

Les points de fonctionnement choisis pour les modèles RCM-1-A et RCM-1-B sont des données de test réelles où ils correspondent aux cas 03 et 11 de l'expérience de Mayer et al [39].

Dans l'expérience de Mayer et al [39], les pressions de la chambre d'injection vont de 40 à 60 bar ; les vitesses moyennes d'injection vont de 2 à 5 m/s et les températures d'injection de 120 à 140 K.

	Pression de chambre (MPa)	Température à l'entrée de l'injecteur (K)	Température à l'entrée de la chambre (K)	Vitesse à l'entrée de la chambre (m/s)	Débit massique (kg/s)
<b>RCM1-A</b> (cas 03)	3.97	120.9	126.9	4.9	0.00995
<b>RCM1-B</b> (cas 11)	5.98	121.7	128.7	4.9	0.01069

Tableau A.1 Points de fonctionnement RCM1-A et RCM1-B du banc d'essai M51

### 1.2. Le banc d'essai M3

Pour atteindre les objectifs de la recherche expérimentale de la combustion en régime supercritique, trois installations de tests cryogéniques ont été développées. Le banc Mascotte à l'ONERA dans le centre de Palaiseau (France, sud-ouest de Paris), M3 et P8 dans le centre aérospatial allemand (DLR) de Lampoldshausen (figure A.4)

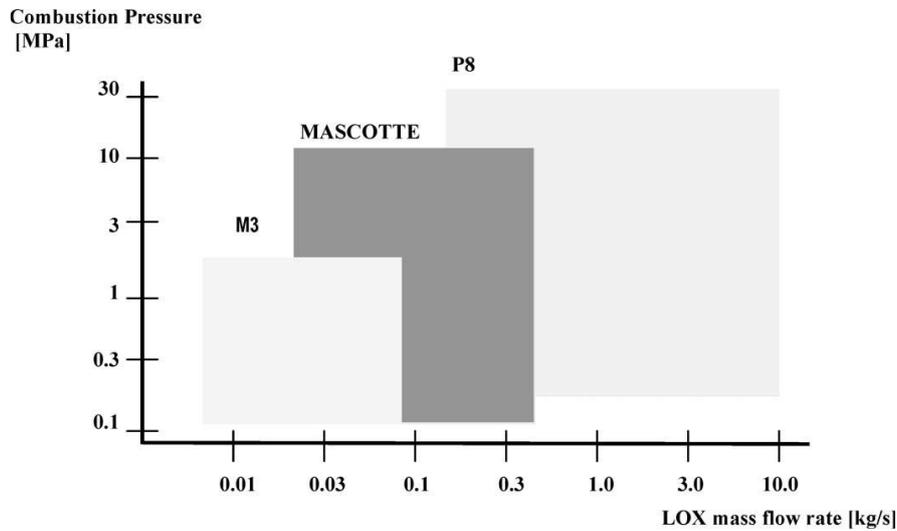


Figure A.4 Domaine de fonctionnement du banc d'essai M3, P8 et Mascotte

La micro chambre de combustion M3 est un banc d'essai de type universitaire pour la recherche de combustion cryogénique et l'atomisation de l'hydrogène/oxygène. Ses principales caractéristiques sont un bain d'azote liquide, les températures d'injection sont de l'ordre de 80 K, afin de minimiser les transitoires de démarrage et d'arrêt. Ce banc d'essai est muni de vannes sensibles avec des temps de réponse inférieure à 5 ms. La chambre de combustion a une section transversale de (60 x 60) mm<sup>2</sup> et une longueur de 140 mm. Sur la figure (A.5) trois injecteurs peuvent être visibles [156].

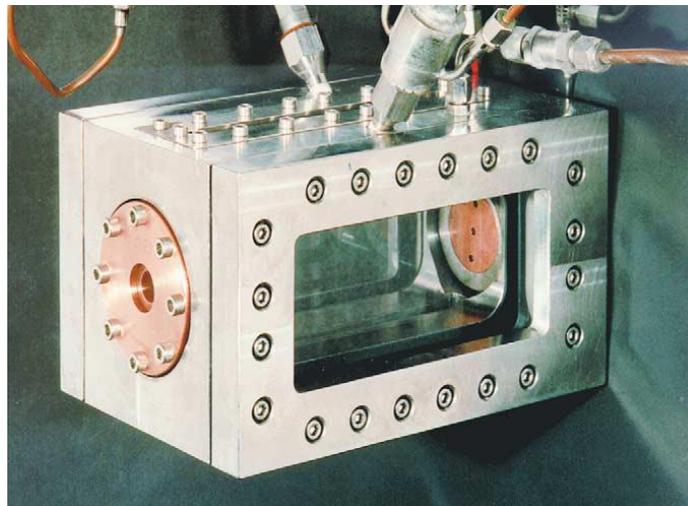


Figure A.5 Banc d'essai M3 [156]

### 1.3. Le banc d'essai P8

L'installation est capable de fonctionner dans une large gamme de conditions de pression et de débit massique très varié (figure A.6).

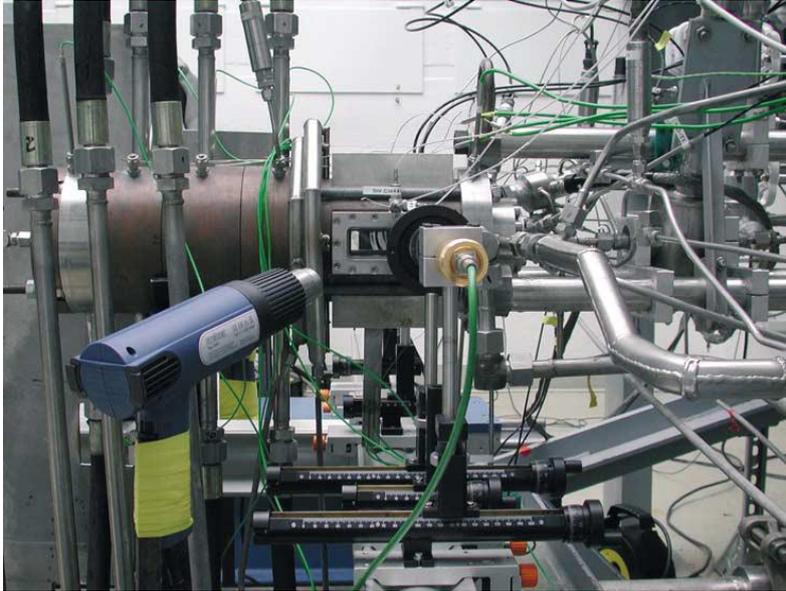


Figure A.6 Chambre de combustion P8 [156]

Les objectifs de ce banc d'essai est la recherche ainsi que les tests de nouvelles technologies à des conditions d'exploitation similaires à celles des moteurs-fusées réels, mais avec des débits massiques à échelle réduite. Les dimensions de la chambre de combustion et d'injection sont les suivantes: longueur 0,5 m, diamètre 50 mm, diamètre de l'injecteur hydrogène 6,5 mm, le diamètre de l'injecteur d'oxygène est de 4 mm, son épaisseur est de 0,3 mm, et l'épaisseur de l'écoulement du liquide de refroidissement de 1,0 mm. Muni d'une vanne de régulation de débit massique haute pression, équipées d'actionneurs afin de faciliter l'ajustement des flux de masse avec une précision de 1%, cela permet également des changements rapides des flux massiques. De cette manière, les différents points de fonctionnement peuvent être réglés au cours d'un même test et donc le nombre total d'essais peut être réduit. La durée de fonctionnement est de 15 secondes [156].

#### 1.4. Le banc d'essai Mascotte

En 1991 l'ONERA initia le développement d'un banc d'essais dédié aux recherches sur la combustion cryotechnique, le banc Mascotte [168], représenté sur la figure A.7. L'objectif, à terme, était de pouvoir reproduire le plus fidèlement possible les mécanismes qui se déroulent en sortie d'un injecteur coaxial dans les moteurs réels.

Dans les cas sub-critique et supercritique, il s'agit des mécanismes d'atomisation primaire et secondaire du jet d'oxygène liquide, de l'évaporation des gouttes et de la combustion turbulente. Un objectif parallèle visait également le développement de méthodes de mesures et de diagnostic optique avancées.

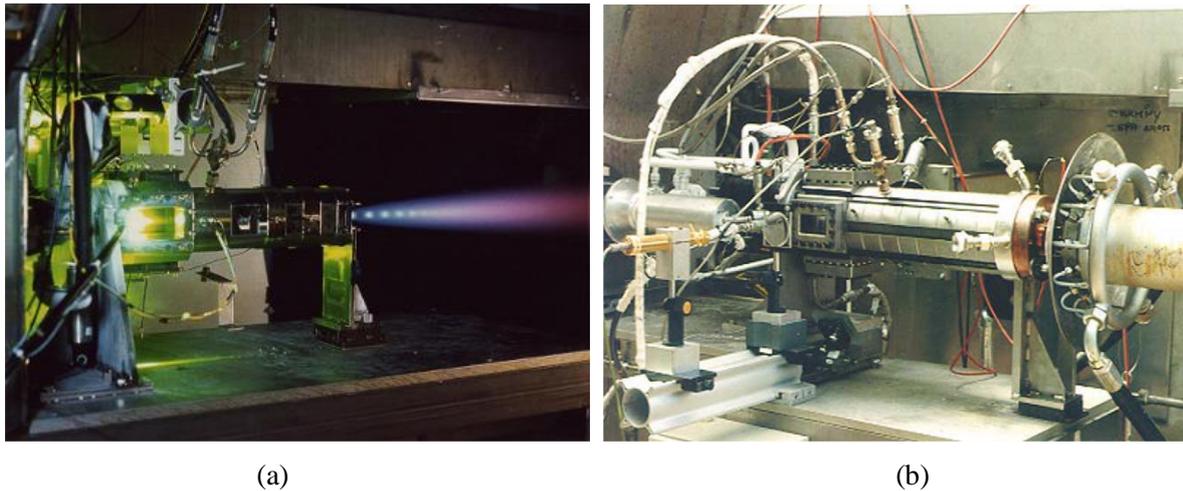


Figure A.7 Visualisation du banc Mascotte en fonctionnement (a) point RCM2-A10. (b) RCM3-A60 [166]

Pour cela, Mascotte fut développé en plusieurs versions successives, se rapprochant de plus en plus des conditions de fonctionnement réelles. Les versions V01 et V02 permettaient ainsi d'atteindre une pression de 10 bars (RCM2). Les premiers essais sur Mascotte V01 débutèrent en 1994, la version V02 fut mise en service l'année suivante. La version V03, mise en service en 1998, permettait d'atteindre 80 bars (RCM3, [156]). Le banc Mascotte (V04 et V05) peut actuellement opérer sous un certain nombre de points de fonctionnement, qui varient selon les paramètres suivants : la pression de chambre visée, les ergols utilisés (par exemple pour la version 04 utilisation du couple  $\text{CH}_4/\text{O}_2$ ) et leurs débits d'injection [172].

La troisième version (V03, figure A.7b) vise la haute pression (10 MPa) dans la chambre de combustion ainsi que l'augmentation de la vitesse maximale d'écoulement de l'oxygène liquide à 85 K (de 100 g/s à 400 g/s) et l'hydrogène gazeux à la température ambiante ou à 100 K (de 75 g/s). Pour la chambre de combustion à haute pression les deux principales exigences de conception fonctionnelles sont les suivantes : permettre l'accès optique et fonctionnement suffisamment long d'une durée (15 s) à la pression maximale de la chambre (10 MPa).

Nous ne détaillons ici qu'un seul de ces points de fonctionnement, lequel fera l'objet de la simulation numérique finale de cette étude. Il s'agit du point de fonctionnement RCM-A-60 [156], dont les caractéristiques de ce point de fonctionnement sont précisées dans le Tableau A.2.

La combustion du propergol cryogénique implique une variété de processus physiques et chimiques couplés. Bien que ces processus soient étroitement liés, on peut régler certains facteurs de contrôle. En plus du rapport de mélange  $R_m$ , l'un des paramètres de similitude les plus importants pour les caractéristiques de l'atomisation est le rapport des flux de quantités de mouvement à l'injection  $J$  ( $R_m$  et  $J$  sont définis dans le chapitre 04).

Point de fonctionnement Mascotte	Pression [MPa]	Debit O <sub>2</sub> [g. s <sup>-1</sup> ]	Debit H <sub>2</sub> [g. s <sup>-1</sup> ]	Rapport d'impulsion <i>J</i>	Rapport <i>R<sub>m</sub></i> du mélange O <sub>2</sub> /H <sub>2</sub>
A	0.1	50	15.0	13.4	3.3
C	0.1	50	10	6.3	5.0
A10	1.05	50	23.7	14.5	2.1
C10	0.95	50	15.8	6.5	3.2
A30	3.0	50	25	15.5	2.0
C30	2.8	54	17	6.6	3.2
<b>A60</b>	<b>6.6</b>	<b>100</b>	<b>70</b>	<b>14.4</b>	<b>1.4</b>
C60	5.8	100	45	6.8	2.2

Table A.2 Conditions opératoires du banc d'essai mascotte [32]

Les Figure A.8 et A.9 représentent la géométrie du de la chambre de combustion Mascotte en version V03, ainsi que celle de l'injecteur. La chambre de combustion est à section carrée (50x50 mm<sup>2</sup>). Cette configuration non axisymétrique permet d'installer plus facilement des accès optiques. Les parois latérales de la chambre sont ainsi équipées de hublots de surface 50x70 mm<sup>2</sup>, pouvant être déplacés le long du boîtier pour visualiser différentes zones de l'écoulement. Des films d'hélium circulent le long des parois des hublots pour les refroidir et permettre l'accès optique à la chambre.

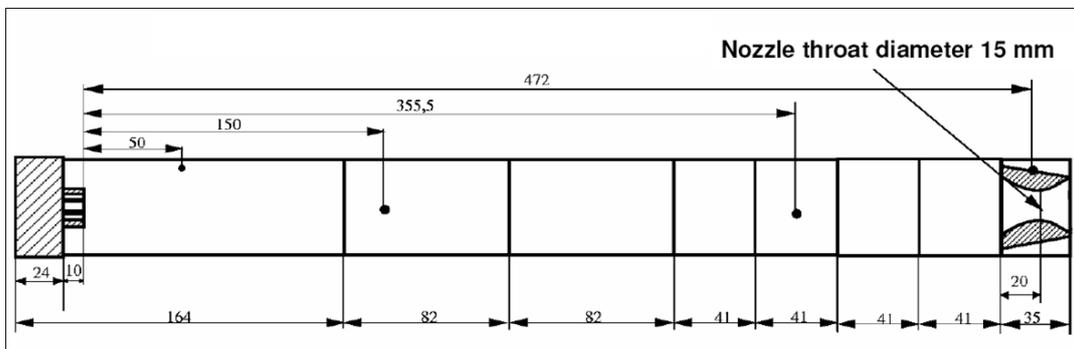


Figure A.8 Géométrie du banc Mascotte [173].

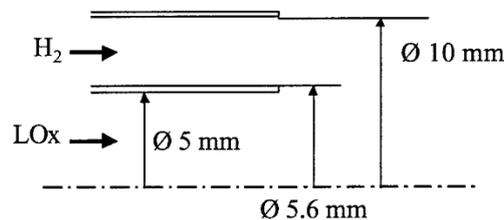


Figure A.9 – Géométrie de l'injecteur coaxial pour le point de fonctionnement Mascotte A-60. [156]

## 2. Schéma réactionnel du mécanisme O Conaire [165]

ELEMENTS

H C O N A R

END

SPECIES

H H<sub>2</sub> O O<sub>2</sub> OH

H<sub>2</sub>O N<sub>2</sub> HO<sub>2</sub> H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> AR

REACTIONS	CAL/MOLE		
H+O2 = O+OH	1.915E+14	0.00	1.644E+04
REV /	5.481E+11	0.39	-2.930E+02 /
O+H2 = H+OH	5.080E+04	2.67	6.292E+03
REV /	2.667E+04	2.65	4.880E+03 /
OH+H2 = H+H2O	2.160E+08	1.51	3.430E+03
REV /	2.298E+09	1.40	1.832E+04 /
O+H2O = OH+OH	2.970E+06	2.02	1.340E+04
REV /	1.465E+05	2.11	-2.904E+03 /
H2+M = H+H+M	4.577E+19	-1.40	1.044E+05
REV /	1.146E+20	-1.68	8.200E+02 /
H2/2.5/ H2O/12.0/			
O2+M = O+O+M	4.515E+17	-0.64	1.189E+05
REV /	6.165E+15	-0.50	0.000E+00 /
H2/2.5/ H2O/12.0/ AR/0.83/			
OH+M = O+H+M	9.880E+17	-0.74	1.021E+05
REV /	4.714E+18	-1.00	0.000E+00 /
H2/2.5/ H2O/12.0/ AR/0.75/			
H2O+M = H+OH+M	1.912E+23	-1.83	1.185E+05
REV /	4.500E+22	-2.00	0.000E+00 /
H2/0.73/ H2O/12.0/ AR/0.38/			
H+O2(+M) = HO2(+M)	1.475E+12	0.60	0.000E+00
! REV /	3.090E+12	0.53	4.887E+04 /
LOW /	3.4820E+16	-4.1100E-01	-1.1150E+03 /
TROE/0.5	1.0000E-30	1.0000E+30	1.0000E+100 /
H2/1.3/ H2O/14.0/ AR/0.67/			
HO2+H = H2+O2	1.660E+13	0.00	8.230E+02
REV /	3.164E+12	0.35	5.551E+04 /
HO2+H = OH+OH	7.079E+13	0.00	2.950E+02
REV /	2.027E+10	0.72	3.684E+04 /
HO2+O = OH+O2	3.250E+13	0.00	0.000E+00
REV /	3.252E+12	0.33	5.328E+04 /
HO2+OH = H2O+O2	2.890E+13	0.00	-4.970E+02
REV /	5.861E+13	0.24	6.908E+04 /
H2O2+O2 = HO2+HO2	4.634E+16	-0.35	5.067E+04
REV /	4.200E+14	0.00	1.198E+04 /
DUPLICATE			

H2O2+O2 = HO2+HO2 1.434E+13 -0.35 3.706E+04  
REV / 1.300E+11 0.00 -1.629E+03 /  
DUPLICATE  
H2O2(+M) = OH+OH(+M) 2.951E+14 0.00 4.843E+04  
! REV / 3.656E+08 1.14 -2.584E+03 /  
LOW / 1.202E+17 0.00 45500. /  
TROE /0.5 1.0E-30 1.0E+30 1.0E+100/  
H2/2.5/ H2O/12.0/ AR/0.64/  
H2O2+H = H2O+OH 2.410E+13 0.00 3.970E+03  
REV / 1.269E+08 1.31 7.141E+04 /  
H2O2+H = H2+HO2 6.025E+13 0.00 7.950E+03  
REV / 1.041E+11 0.70 2.395E+04 /  
H2O2+O = OH+HO2 9.550E+06 2.00 3.970E+03  
REV / 8.660E+03 2.68 1.856E+04 /  
H2O2+OH = H2O+HO2 1.000E+12 0.00 0.000E+00  
REV / 1.838E+10 0.59 3.089E+04 /  
DUPLICATE  
H2O2+OH = H2O+HO2 5.800E+14 0.00 9.557E+03  
REV / 1.066E+13 0.59 4.045E+04 /  
DUPLICATE  
END