

N° d'ordre :

Nombre d'exemplaires : ...

Exemplaire N° : ... / ...

**UNIVERSITE MONTPELLIER II
SCIENCES ET TECHNIQUES DU LANGUEDOC**

THESE

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE MONTPELLIER II

Discipline : Mathématiques

Formation Doctorale : Mathématiques et leurs interactions

Ecole Doctorale : Information, Structures, Systèmes

présentée et soutenue publiquement

par

Léa ARTAL

le 21 février 2006

Titre :

**MODELISATION DES FLUX DE CHALEUR
STATIONNAIRES
POUR UN MELANGE MULTI-ESPECE
AVEC TRANSFERT DE MASSE A LA PAROI**

JURY

M.	Franck Nicoud	Université Montpellier II	Directeur de thèse
M.	Patrick Chassaing	INPT	Rapporteur
Mme.	Françoise Daumas-Bataille	Université Perpignan	Rapporteur
M.	Alexandre Ern	CERMICS - ENPC	Examinateur
M.	Pierre Millan	ONERA	Examinateur
M.	Bijan Mohammadi	Université Montpellier II	Examinateur
M.	Jean-Marc Déoclézian	Snecma Propulsion Solide	Membre invité

Référence CERFACS :TH/CFD/06/12

A mes parents.

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier Franck Nicoud¹, pour m'avoir guidée en tant que directeur de thèse, pour sa disponibilité, et les précieux conseils et remarques constructives qu'il a su me donner pendant ces trois années. Toutes nos discussions ont été aussi enrichissantes que motivantes, toutes nos rencontres m'ont permis d'attaquer mon travail de thèse avec un souffle nouveau. Je lui exprime ainsi toute ma reconnaissance.

Je tiens également à remercier Thierry Poinso² pour m'avoir accueillie au sein de l'équipe CFD du CERFACS.

En acceptant d'être les rapporteurs de ma thèse, Monsieur Patrick Chassaing³ et Madame Françoise Daumas-Bataille⁴ m'ont fait un immense plaisir. Je les remercie très sincèrement pour le temps précieux qu'ils ont consacré à évaluer mon travail de thèse, et pour l'intérêt qu'ils ont manifesté à l'égard de celui-ci. Leurs remarques et leurs conclusions ont été particulièrement motivantes.

Je remercie aussi chaleureusement Monsieur Pierre Millan⁵, président de mon jury de thèse, ainsi que Messieurs Alexandre Ern⁶ et Bijan Mohammadi¹, qui ont tous les trois accepté d'être examinateurs de mon travail de thèse. Je remercie aussi Jean-Marc Déoclézian⁷ pour avoir participé à mon jury de thèse en tant que membre invité.

Mes remerciements vont également à SNECMA PROPULSION SOLIDE, qui a initié et financé cette étude. Plus particulièrement, j'adresse mes remerciements à Jean-Marc Déoclézian et Philippe Aubrun⁸ avec qui j'ai interagi et entretenu d'excellentes relations au cours de ces trois années.

Je remercie la dynamique équipe CFD, au sein de laquelle j'ai beaucoup appris.

¹Professeur à l'Université de Montpellier II, Laboratoire I3M

²Directeur de recherche, IMF Toulouse, CNRS

³Professeur à l'INPT - ENSEEIHT Toulouse et Directeur du département Mécanique des Fluides et Propulsion de l'ENSICA

⁴Professeur au PROMES - CNRS, Université de Perpignan

⁵Directeur de recherche à l'ONERA, Département DMAE, Centre de Toulouse

⁶Professeur au CERMICS - ENPC, Marne La Vallée

⁷SNECMA PROPULSION SOLIDE, Responsable de la section Calculs aérothermiques et thermiques

⁸SNECMA PROPULSION SOLIDE, Section Calculs aérothermiques et thermiques

J'adresse également mes remerciements à l'équipe CSG du support informatique, ainsi qu'à l'équipe administrative, en particulier à Chantal, Michèle et Marie.

Je remercie Jenny et Séverine, qui se sont succédées en tant que documentaliste au CERFACS, pour leur bonne humeur, ainsi que leur rapidité pour obtenir les articles scientifiques.

Je tiens aussi à remercier Bernadette Lacan et Pierrette Arnaud, secrétaires au département de mathématiques de l'Université de Montpellier II.

Un grand merci à la joyeuse équipe du week-end (avec une mention spéciale pour "leul meu"...) pour tous les repas chaleureux et animés, les belles randonnées dans les Pyrénées et les ballades à la découverte de la région toulousaine.

Enfin, je remercie mes parents pour leur soutien indéfectible et sans égal au cours de la thèse, mais aussi pendant le long parcours d'études qui a précédé la thèse.

Table des matières

Nomenclature	11
Table des figures	15
Introduction	23
I Préambules et étude bibliographique	27
1 Turbulence	29
1.1 Caractéristiques de la turbulence	29
1.2 Paramètres de contrôle de la turbulence	32
1.3 Quelques corrélations	32
1.3.1 Couche limite sur plaque plane	33
1.3.2 Augmentation des transferts thermiques	34
1.3.3 Augmentation des frottements pariétaux	35
1.4 Simulation numérique de la turbulence	35
1.4.1 Les méthodes RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)	36
1.4.2 La Simulation Numérique Directe	38
1.4.3 La Simulation des Grandes Echelles	39
2 Physique et modélisation des écoulements sur paroi inerte	41
2.1 La couche limite turbulente	41
2.1.1 Structure de la couche limite turbulente	42
2.1.2 Structure de la zone interne	42
2.1.3 Equations de la zone interne	44
2.1.4 Le paramètre d'isothermicité	46
2.2 Calcul des flux pariétaux et modèles de paroi	47
2.3 Modèles de paroi pour le cas quasi isotherme	49
2.3.1 La fermeture du problème turbulent	49
2.3.2 Lois de paroi dynamiques et thermiques	50
2.4 Modèles de paroi et lois de paroi pour le cas anisotherme	52
2.4.1 Formulation de Chieng & Launder modifiée	53

2.4.2	Approche macroscopique	55
2.4.3	Le modèle de paroi LnKC [4]	59
2.4.4	Les lois de paroi LMF et LTM [24]	62
2.4.5	Conclusion	64
3	La Simulation Numérique Directe	65
3.1	Bref historique de la Simulation Numérique Directe	65
3.2	Considérations numériques	66
3.2.1	Deux types de DNS	66
3.2.2	Méthodes numériques privilégiées en DNS	67
3.2.3	Conditions initiales	71
3.2.4	Conditions aux limites	72
3.3	Apports de la DNS	73
3.3.1	Turbulence homogène isotrope	73
3.3.2	Canaux et couches limites	74
3.4	La présente étude	75
4	Modélisation d'un mélange gazeux multi-espèce réactif	79
4.1	Equations de transport	79
4.1.1	Conservation de la masse	79
4.1.2	Conservation de la quantité de mouvement	80
4.1.3	Conservation de l'énergie	80
4.2	Flux de transport	81
4.3	Systèmes linéaires de transport	82
4.3.1	Contraintes physiques	82
4.3.2	Cas des fractions massiques qui tendent vers zéro	83
4.4	Différentes modélisations de la vitesse de diffusion	83
4.4.1	Approche analytique	83
4.4.2	Approximation de Bird	84
4.4.3	Approximation de Hirschfelder-Curtiss	85
4.4.4	Conclusions	85
4.5	Cinétique chimique	86
4.5.1	Taux de réaction massique	86
4.5.2	Dégagement de chaleur	87

II Simulations Numériques Directes réalisées et lois de paroi développées, en parois inertes 89

1	DNS d'écoulements turbulents en canal plan 3D avec parois inertes	93
1.1	Configuration des DNS	93
1.1.1	Canal quasi isotherme avec de l'air	95
1.1.2	Canal anisotherme avec de l'air	96

1.1.3	Canal anisotherme avec mélange gazeux multi-espèce non réactif . . .	97
1.2	DNS de canal quasi isotherme avec de l'air	98
1.2.1	Turbulence de canal	98
1.2.2	Statistiques	103
1.3	DNS de canal anisotherme avec de l'air	106
1.3.1	Turbulence de canal	106
1.3.2	Statistiques	111
1.4	Apport de la DNS de canal anisotherme avec mélange multi-espèce inerte .	114
1.4.1	Processus d'homogénéisation	114
1.4.2	Influence du nombre de Prandtl moléculaire	116
1.4.3	Loi de paroi	116
1.5	Conclusion	119
2	DNS en mélange multi-espèce réactif et parois inertes	121
2.1	Configuration de la DNS	121
2.2	Intensité de la turbulence	124
2.3	Effet de la chimie	125
2.4	Equilibre chimique	125
2.5	Influence de la chimie	127
2.6	Bilan d'énergie	129
2.7	Frottement pariétal	132
2.8	Flux de chaleur pariétal	133
2.9	Lois de paroi	136
2.10	Profils de température et de vitesse	137
2.10.1	Profil de température	138
2.10.2	Profil de vitesse	138
2.11	Loi de paroi à Mach élevé pour un mélange multi-espèce réactif	139
2.12	Conclusion	140
III	Prise en compte de l'ablation	143
1	Ablation	145
1.1	Importance technique et scientifique	145
1.2	Mécanismes de contrôle et modélisation de l'ablation	146
1.2.1	Facteurs influants et mécanismes de contrôle	146
1.2.2	Modèle pour le taux de récession de la paroi [52]	147
1.3	Bilans massique et énergétique de surface	148
1.3.1	Bilan massique de surface	149
1.3.2	Bilan énergétique de surface	150
1.4	Adaptation du code de calcul AVBP	151
1.4.1	Description de la chimie en surface	151
1.4.2	Condition limite d'ablation	152

1.4.3	Implémentation de la condition limite d'ablation dans AVBP	154
2	DNS en mélange multi-espèce réactif et parois ablatées	155
2.1	Prise en compte de l'effet de soufflage	155
2.2	Modification du domaine de simulation	156
2.3	Evolutions temporelles	157
2.4	Exploitation des résultats de la DNS	159
2.4.1	Bilan énergétique	159
2.4.2	Profils de température et de vitesse	162
2.4.3	Equilibre chimique	163
2.4.4	Flux d'espèce à la paroi	164
2.4.5	Flux de chaleur	167
2.5	Loi de paroi	167
	Conclusion de l'étude et perspectives	171
A	Le code utilisé : AVBP	173
B	Thermochimie	175
B.1	Choix d'un mélange équivalent	175
B.1.1	P = 1 MPa	176
B.1.2	P = 6 MPa	177
B.1.3	P = 10 MPa	177
B.2	Schéma cinétique	178
B.2.1	P = 1 MPa	180
B.2.2	P = 6 MPa	182
B.2.3	P = 10 MPa	183
B.3	AVBP et le schéma cinétique réduit avec troisième corps	184
C	Communications	187

Nomenclature

Lettres latines

B_q	Flux de chaleur adimensionné – $B_q = q_w / (\rho_w C_p u_\tau T_w)$	-
c	Célérité du son	m.s^{-1}
C_f	Coefficient de frottement	-
C_H	Nombre de Stanton pour le transfert de chaleur	-
C_M	Nombre de Stanton pour le transfert de masse	-
C_p	Capacité thermique massique à pression constante	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
$C_{p,i}$	Capacité thermique massique à pression constante de l'espèce i	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
C_v	Capacité thermique massique à volume constant	$\text{J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$
C_μ	Constante du modèle de turbulence $k - \varepsilon$	-
D	Diamètre	m
D_h	Diamètre hydraulique	m
$\mathbf{D} = (D_{ij})_{i,j \in \{1, \dots, ns\}}$	Matrice de diffusion multicomposant	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
$D_{i,mix}$	Coefficient de diffusion de l'espèce i dans le mélange	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
\mathcal{D}_{ij}^{bin}	Coefficient de diffusion binaire relatif aux espèces i et j	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
e_t	Energie totale chimique	J.kg^{-1}
E_{act}	Energie d'activation	cal.mol^{-1}
E_j	Energie d'activation de la réaction j	cal.mol^{-1}
\mathcal{F}_i	Flux de diffusion de l'espèce i	$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
h	Demi-hauteur du canal	m
h_i	Enthalpie de l'espèce i	J.kg^{-1}
h_s	Enthalpie sensible	J.kg^{-1}
h_t	Enthalpie totale chimique	J.kg^{-1}
H	Enthalpie totale non chimique	J.kg^{-1}
$\tilde{j}_{k,w}$	Flux de diffusion de l'atome k indépendamment de sa configuration moléculaire	$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
k	Energie cinétique turbulente	$\text{m}^2.\text{s}^{-2}$
$K_{f,j}$	Taux d'avancement de la réaction j	s^{-1}
$K_{r,j}$	Taux de récession de la réaction j	s^{-1}
Kn	Nombre de Knudsen	-
l_m	Longueur de mélange	m

Lettres latines

Le	Nombre de Lewis – $Le = Sc/Pr$	-
L_x	Longueur du canal	m
L_x^+	Longueur adimensionnée du canal – $L_x^+ = L_x/y_\tau$	-
L_y	Hauteur du canal – $L_y = 2h$	m
L_y^+	Hauteur adimensionnée du canal – $L_y^+ = L_y/y_\tau$	-
L_z	Envergure du canal	m
L_z^+	Envergure adimensionnée du canal – $L_z^+ = L_z/y_\tau$	-
\dot{m}	Débit	kg.m ⁻² .s ⁻¹
Ma	Nombre de Mach de l'écoulement	-
Nu	Nombre de Nusselt	-
p, P	Pression	Pa
Pe	Nombre de Péclet moléculaire	-
Pe_t	Nombre de Péclet turbulent	-
Pr	Nombre de Prandtl moléculaire	-
Pr_t	Nombre de Prandtl turbulent	-
q	Flux de chaleur	W.m ⁻²
Q_j	Taux de progression de la réaction j	mol.m ⁻³ .s ⁻¹
\dot{r}	Taux de récession de la paroi ablatée	m.s ⁻¹
\dot{r}_{ch}	Taux de la cinétique chimique des réactions hétérogènes	m.s ⁻¹
\dot{r}_d	Taux de diffusion des espèces oxydantes à la surface	m.s ⁻¹
R	Constante des gaz parfaits – $R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$	J.mol ⁻¹ .K ⁻¹
Re	Nombre de Reynolds	-
Re_t	Nombre de Reynolds turbulent	-
Re_τ	Nombre de Reynolds de frottement – $Re_\tau = u_\tau h/\nu$	-
S_e	Terme source volumique destiné à chauffer le fluide	kg.m ⁻¹ .s ⁻³
S_{qdm}	Terme source ajouté à la composante longitudinale de l'équation de conservation de la quantité de mouvement	kg.m ⁻² .s ⁻²
S_{DNS}	Terme source ajouté à l'équation de conservation de l'enthalpie totale chimique – $S_{DNS} = uS_{qdm} + S_e$	kg.m ⁻¹ .s ⁻³
Sc	Nombre de Schmidt	-
Sc_i	Nombre de Schmidt de l'espèce i	-
Sc_t	Nombre de Schmidt turbulent	-
\dot{s}	Taux d'avancement de la réaction chimique	mol.m ⁻² .s ⁻¹

Lettres latines

\dot{s}_i	Taux de production surfacique de l'espèce i	$\text{kg.m}^{-2}.\text{s}^{-1}$
T	Température	K
T_τ	Température de frottement – $T_\tau = q_w/(\rho_w C_p u_\tau)$	K
T^+	Température adimensionnée – $T^+ = (T_w - T)/T_\tau$	-
u, v, w	Composantes longitudinale, normale et transverse du vecteur vitesse	m.s^{-1}
u_τ	Vitesse de frottement – $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho_w}$	m.s^{-1}
u^+	Vitesse longitudinale adimensionnée – $u^+ = u/u_\tau$	-
V_{ab}	Vitesse d'ablation	m.s^{-1}
V_{ab}^+	Vitesse d'ablation adimensionnée – $V_{ab}^+ = V_{ab}/u_\tau$	-
V_{cor}	Vitesse de correction	m.s^{-1}
V_i	Vitesse de diffusion de l'espèce i	m.s^{-1}
V_{inj}	Vitesse d'injection des gaz issus de l'ablation de la paroi en carbone	m.s^{-1}
V_{inj}^+	Vitesse d'injection adimensionnée – $V_{inj}^+ = V_{inj}/u_\tau$	-
\bar{W}	Masse molaire du mélange gazeux	kg.mol^{-1}
W_i	Masse molaire de l'espèce i	kg.mol^{-1}
X_i	Fraction molaire de l'espèce i	-
y_τ	Echelle spatiale caractéristique de la zone interne d'une couche limite – $y_\tau = \nu_w/u_\tau$	m
y^+	Distance adimensionnelle à la paroi – $y^+ = y/y_\tau$	-
Y_i	Fraction massique de l'espèce i	-
\tilde{Y}_k	Fraction massique totale de l'atome k indépendamment de sa configuration moléculaire	-

Lettres grecques

γ	Coefficient isentropique	-
δ	Epaisseur de la couche limite	m
$\Delta h_{f,i}^0$	Enthalpie massique de formation de l'espèce i à la température de référence T_0	J.kg^{-1}
ϵ	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	$\text{m}^2.\text{s}^{-3}$
η	Viscosité en volume	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
κ	Constante de von Kàrmàn – $\kappa = 0.4$	-

Lettres grecques

λ	Conductivité thermique	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
λ_t	Conductivité thermique turbulente	$\text{W.m}^{-1}.\text{K}^{-1}$
μ	Viscosité dynamique moléculaire	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
μ_t	Viscosité dynamique turbulente	$\text{kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$
ν	Viscosité cinématique moléculaire	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
ν_t	Viscosité cinématique turbulente	$\text{m}^2.\text{s}^{-1}$
ν_i	Coefficient stœchiométrique de l'espèce i	-
$\chi = (\chi_i)_{i \in \{1, \dots, ns\}}$	Rapport de diffusion thermique	K^{-1}
ρ	Densité	kg.m^{-3}
τ	Tenseur total de cisaillement	Pa
τ_{Dt}	Temps de diffusion turbulente – $\tau_{Dt} = h/u_\tau$	s
$\dot{\omega}_i$	Taux de production massique de l'espèce i	$\text{kg.m}^{-3}.\text{s}^{-1}$
$\dot{\omega}_T$	Dégagement de chaleur dû aux réactions chimiques	W.m^{-3}

Indices

- c Sur l'axe du canal
 w A la paroi

Exposants

- ' Partie fluctuante au sens de Reynolds d'une quantité
 " Partie fluctuante au sens de Favre d'une quantité
 + Relatif à l'adimensionnement par une variable caractérisant la couche limite
 e Relatif au bord extérieur de la couche limite
 ∞ Relatif à l'écoulement infini amont

Opérateurs

- $\overline{(\quad)}$ Moyenne de Reynolds
 $\widetilde{(\quad)}$ Moyenne de Favre
 ∇ Opérateur du gradient

Table des figures

1	Phénomènes physiques présents dans la tuyère	23
2	Approche bas-Reynolds (lignes horizontales : maillage)	25
3	Approche haut-Reynolds (lignes horizontales : maillage)	25
1.1	Croquis, d'après White F. [104], de la transition d'une couche limite laminaire vers le régime turbulent pour une plaque plane sans gradient de pression : écoulement laminaire, ondes d'instabilité de Tollmien-Schlichting (T-S), évolution non linéaire et tridimensionnelle, formation de zones à rotationnel, apparition de bouffées turbulentes, turbulence pleinement développée.	33
1.2	Comparaison des approches RANS, LES et DNS	36
2.1	Structure d'une couche limite pariétale turbulente quasi isotherme	43
2.2	Principe des modèles de paroi	48
3.1	Configuration d'une DNS spatiale - Couche limite sur plaque plane	67
3.2	Configuration d'une DNS temporelle - Ecoulement de conduite	67
3.3	Configuration de nos DNS	77
1.1	Géométrie du domaine de calcul et système de coordonnées	94
1.2	Evolution temporelle de la température moyenne pour le canal quasi isotherme	98
1.3	Evolution temporelle de la vitesse u en un point au centre du canal quasi isotherme	99
1.4	Evolution temporelle de la vitesse v en un point au centre du canal quasi isotherme	99
1.5	Tenseurs de cisaillement au mur et isocontours de vitesse longitudinale pour le canal quasi isotherme	100
1.6	Flux de chaleur pariétal et isocontours de température pour le canal quasi isotherme	101
1.7	Isocontours instantanés de u dans un plan (y, z)	102
1.8	Isocontours instantanés de v dans un plan (y, z)	102
1.9	Isocontours instantanés de w dans un plan (y, z)	102
1.10	Isocontours dans un plan (y, z) à $x = L_x/2$ du champ de température instantanée pour le canal quasi isotherme	102

1.11	Profil de densité moyenne pour le canal quasi isotherme	103
1.12	Profil de température moyenne pour le canal quasi isotherme	103
1.13	Profil de u moyen pour le canal quasi isotherme	104
1.14	Profil de vitesse longitudinale moyenne et loi de paroi universelle pour le canal quasi isotherme. \circ : AVBP ; $:$ Loi logarithmique $u^+ = 2.5 \ln(y^+) + 5.5$; $-.. - ..$: Loi logarithmique $u^+ = 2.5 \ln(y^+) + 5$; $- - -$: Loi linéaire $u^+ = y^+$	105
1.15	Fluctuations de vitesses RMS normées par la vitesse de frottement à la paroi, pour le canal quasi isotherme	105
1.16	Evolution temporelle de la température moyenne pour le canal anisotherme	106
1.17	Evolution temporelle de la vitesse u en un point au centre du canal anisotherme	107
1.18	Evolution temporelle de la vitesse v en un point au centre du canal anisotherme	107
1.19	Tenseurs de cisaillement au mur et isocontours de vitesse longitudinale pour le canal anisotherme	108
1.20	Flux de chaleur pariétal et isocontours de température pour le canal anisotherme	109
1.21	Isocontours instantanés de u dans un plan (y, z)	109
1.22	Isocontours instantanés de v dans un plan (y, z)	109
1.23	Isocontours instantanés de w dans un plan (y, z)	109
1.24	Isocontours dans un plan (y, z) à $x = L_x/2$ du champ de température instantanée pour le canal anisotherme	110
1.25	Profils de \bar{u} et \tilde{u} pour le canal anisotherme	111
1.26	Profil de densité moyenne pour le canal anisotherme	111
1.27	Profil de température moyenne pour le canal anisotherme	111
1.28	Profils de \bar{u} , \bar{v} et \bar{w} pour le canal anisotherme	112
1.29	Profil de vitesse longitudinale moyenne et loi de paroi universelle pour le canal anisotherme. \square : AVBP ; $:$ Loi logarithmique $u^+ = 2.5 \ln(y^+) + 5.5$; $- - -$: Loi linéaire : $u^+ = y^+$	113
1.30	Valeurs RMS des fluctuations de vitesse dans le canal quasi isotherme et le canal anisotherme	114
1.31	Evolution temporelle des fractions massiques des sept espèces du mélange pour $P = 10$ MPa. $- - -$: Fraction massique maximale ; \dots : Fraction massique moyenne ; $:$ Fraction massique minimale	115
1.32	Profil de T^+ à $Pr = 0.47$ dans la DNS avec mélange multi-espèce non réactif et parois inertes (avec ajout de T^+ à $Pr = 0.47$ avec chimie)	117
1.33	Profil de T^+ à $Pr = 1$ dans la DNS avec mélange multi-espèce non réactif et parois inertes (avec ajout de T^+ à $Pr = 1$ avec chimie)	118
2.1	Géométrie du domaine de calcul et système de coordonnées	122
2.2	Evolution temporelle de u au centre du canal avec mélange réactif et parois inertes, $Re_\tau = 180$ et $Pr = 0.47$	124

2.3	Evolution temporelle des fractions massiques minimales, moyennes et maximales de H_2 , N_2 , CO et H_2O à $Re_\tau = 180$ et $Pr = 0.47$. — — — : Fraction massique maximale; ... : Fraction massique moyenne; : Fraction massique minimale	125
2.4	Equilibre chimique dans le canal avec mélange réactif et parois inertes, à $Re_\tau = 180$. \circ : Fractions massiques moyennes obtenues par post-traitement de la DNS; : Fractions massiques à l'équilibre obtenues à partir du profil de température moyenne et des courbes d'équilibre	126
2.5	Flux de chaleur total dans un canal multi-espèce sans chimie à $Pr = 1$ et $Re_\tau = 180$	127
2.6	Flux de chaleur total dans le canal minimal avec chimie et parois inertes à $Pr = 1$ et $Re_\tau = 180$	128
2.7	Dérivée par rapport à y du flux de chaleur total pour le canal minimal avec chimie et parois inertes (demi-canal supérieur)	128
2.8	Comparaison entre $\dot{\omega}_T$ et S_e à $Pr = 0.47$ et $Pr = 1$ pour le canal minimal avec parois inertes (demi-canal supérieur)	129
2.9	Bilan d'énergie dans la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$	132
2.10	Flux de quantité de mouvement $\bar{\mu} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} - \bar{\rho} \overline{u''v''}$ dans la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$	133
2.11	Flux de chaleur turbulent $\bar{\rho} \overline{C_p v' T'} \Delta h_{f,k}^0$ de la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$	134
2.12	Profils de $\bar{\rho} v' \overline{Y_{H_2O}''}$ et $\bar{\rho} v' \overline{Y_{H_2O}'}$, $Re_\tau = 280$	135
2.13	Flux de chaleur induit par la diffusion turbulente des espèces $\sum_{k=1}^{ns} \bar{\rho} v' \overline{Y_k'} \Delta h_{f,k}^0$ de la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$	135
2.14	Profil de température de la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$. \circ : DNS; — — — : Loi de paroi LMF-Pr-chimie; : Loi LMF-Pr; ... : Loi LMF	138
2.15	Profil de vitesse de la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$. \circ : DNS; — — — : Loi de paroi LMF-Pr-chimie; : Loi LMF; ... : Loi logarithmique	139
1.1	Couplage entre la phase gazeuse et la phase solide, dans le modèle du taux de récession de la paroi proposé par <i>Keswani & Kuo</i> [52]	148
1.2	Flux de masse en termes d'atomes à la surface d'un matériau carboné soumis à de l'ablation	150
1.3	Flux d'énergie à la surface d'un matériau carboné soumis à de l'ablation	151
2.1	Evolutions temporelles (en secondes) des pressions (en Pa), températures (en K) et densités (en kg/m^3) minimales, moyennes et maximales dans la DNS avec ablation. ; ... : valeur moyenne; — — — : valeur maximale	157
2.2	Evolution temporelle (en secondes) de la fraction massique de CO au mur	158
2.3	Evolution temporelle (en secondes) de la fraction massique de H_2 au mur	158
2.4	Evolution temporelle (en secondes) de la fraction massique de H_2O au mur	158
2.5	Evolution temporelle (en secondes) de la vitesse d'ablation en m/s	158
2.6	Profils moyens de Y_{H_2O} normés par $Y_{H_2O,e}$, à divers temps de la DNS à $Re_\tau = 180$ (demi-canal inférieur)	159

2.7	Flux d'enthalpie totale après cinq temps de diffusion turbulente ($Re_\tau = 180$)	161
2.8	Flux d'enthalpie totale après quinze temps de diffusion turbulente ($Re_\tau = 180$)	161
	: Loi LMF-Pr; ... : Loi LMF162	
	: Loi LMF-Pr; ... : Loi LMF162	
	: Loi LMF; ... : Loi logarithmique $u^+ = (1/\kappa)\ln(y^+) + 5.5163$	
	: Loi LMF; ... : Loi logarithmique $u^+ = (1/\kappa)\ln(y^+) + 5.5163$	
2.13	Profils des fractions molaires des atomes de carbone, oxygène, hydrogène et azote. : DNS avec parois inertes; ... : DNS avec ablation, après 5 temps de diffusion turbulente; -.-.- : DNS avec ablation, après 15 temps de diffusion turbulente	164
2.14	Valeurs de C_M trouvées avec la DNS. : Coefficients de diffusion égaux; - - - : Coefficients de diffusion non égaux	166
2.15	Croquis de la future loi de paroi avec ablation	168
B.1	Réactions chimiques élémentaires issues de GRI-Mech et écrites au format CHEMKIN	179
B.2	Evolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur pour $P = 1$ MPa. + + + : Schéma GRI-Mech complet; : Schéma réduit; - - - : Schéma réduit sans troisième corps	181
B.3	Comparaison entre AURORA PSR avec schéma cinétique réduit et les données de Snecma Propulsion Solide pour $P = 1$ MPa. Symboles : Snecma Propulsion Solide; Lignes en trait plein, pointillés et tirets : Calculs AURORA PSR avec le schéma cinétique réduit	181
B.4	Evolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur pour $P = 6$ MPa. + + + : Schéma GRI-Mech complet; : Schéma réduit; - - - : Schéma réduit sans troisième corps	182
B.5	Comparaison entre AURORA PSR avec schéma cinétique réduit et les données de Snecma Propulsion Solide pour $P = 6$ MPa. Symboles : Snecma Propulsion Solide; Lignes en trait plein, pointillés et tirets : Calculs AURORA PSR avec le schéma cinétique réduit	183
B.6	Evolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur pour $P = 10$ MPa. + + + : Schéma GRI-Mech complet; : Schéma réduit; - - - : Schéma réduit sans troisième corps	184
B.7	Comparaison entre AURORA PSR avec schéma cinétique réduit et les données de Snecma Propulsion Solide pour $P = 10$ MPa. Symboles : Snecma Propulsion Solide; Lignes en trait plein, pointillés et tirets : Calculs AURORA PSR avec le schéma cinétique réduit	184
B.8	Comparaison entre AVBP avec schéma cinétique réduit et AURORA PSR pour les fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O à 1 MPa initialement. + + + : AURORA PSR; : AVBP	185

B.9	Comparaison entre AVBP avec schéma cinétique réduit et AURORA PSR pour les fractions molaires de H , CO_2 et OH à 1 MPa initialement. + + + : AURORA PSR; : AVBP	186
B.10	Comparaison entre AVBP avec schéma cinétique réduit et AURORA PSR pour la température du mélange à 1 MPa initialement. + + + : AURORA PSR; : AVBP	186

Introduction

Les tuyères d'éjection des gaz des moteurs-fusées à propergol solide (MPS) sont soumises à des flux thermiques considérables, qui résultent des conditions thermodynamiques très sévères régnant dans les chambres de combustion de ces moteurs. De plus, elles sont attaquées chimiquement par les gaz éjectés (phénomène d'ablation) et subissent une érosion mécanique par impact de particules¹. Le croquis de la figure 1 illustre les phénomènes physiques qui se produisent dans le fond arrière d'un MPS, et donne un aperçu de la complexité de la situation.

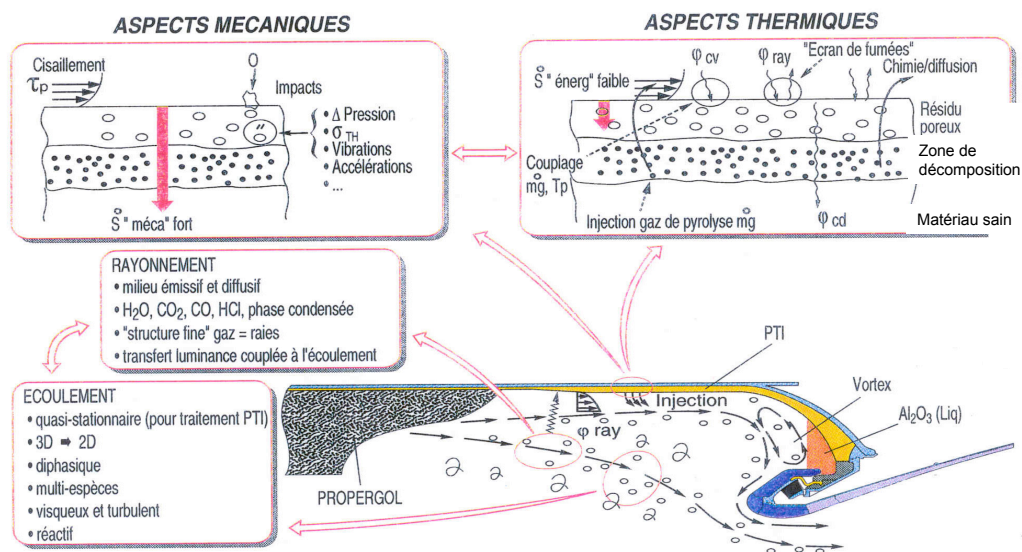


Fig. 1: Phénomènes physiques présents dans la tuyère

Afin d'assurer l'intégrité des tuyères, des calculs précis de flux thermiques pariétaux s'avèrent nécessaires. Ils permettent d'optimiser le dimensionnement thermo-ablatif des matériaux isolants et protecteurs dont sont revêtues les parois des tuyères. D'une part, les coûts de construction et de lancement des fusées s'en trouvent réduits ; d'autre part, la maîtrise de l'évolution de la section de passage des gaz au col, sous l'effet du phénomène d'ablation, permet de garantir un bon niveau de performances grâce à la conservation de la poussée.

¹Les gaz éjectés par les tuyères contiennent des particules d'alumine à hauteur de 35% en terme de débit massique.

Pour des raisons financières évidentes, le nombre d'essais de mise au point d'un propulseur à propergol solide est limité, et les itérations sur sa définition sont quasiment impossibles : il faut faire bon du premier coup. Par conséquent :

- les architectures des propulseurs sont extrapolées de l'existant, en maîtrisant au mieux les risques de développement, ce qui limite les sauts technologiques ;
- d'autre part, la modélisation numérique joue un rôle de plus en plus important dans l'élaboration du dimensionnement, en compensation de la diminution du nombre des essais.

Ainsi, l'utilisation intensive de modèles numériques décrivant de mieux en mieux les phénomènes physiques mis en jeu apparaît comme un élément indispensable à la réalisation d'avancées technologiques en propulsion solide. Pour ce faire, les efforts de modélisation doivent être concentrés sur : le calcul de l'écoulement et des sollicitations pariétales (frottement et flux de chaleur), d'une part, la réponse thermo-ablative des matériaux, d'autre part.

L'amélioration des méthodes de calcul actuelles de l'écoulement et des sollicitations passe par l'utilisation de codes d'aérothermique modélisant les écoulements turbulents tridimensionnels diphasiques dans le propulseur et la tuyère. Dans cette optique, Snecma Propulsion Solide désire se munir d'un outil performant, capable de calculer les flux de chaleur dans les différentes zones de ses gros moteurs à propergol solide. L'objectif de ce type de code est de rendre possible la prise en compte de la turbulence, de la chimie, du diphasique (présence de particules d'alumine à hauteur de 35% en terme de débit massique) et du rayonnement. La modélisation des échanges pariétaux est un élément clé car les transferts thermiques constituent une donnée d'entrée pour le dimensionnement des matériaux isolants. Dans les tuyères, l'incidence du rayonnement est assez faible, tandis que les flux convectifs sont prépondérants à cause du fort confinement et des vitesses élevées. La détermination des flux de chaleur (et donc le dimensionnement de la tuyère ablatable en carbone/carbone) passe :

- soit par l'utilisation d'un modèle de turbulence de type bas-Reynolds (figure 2), qui est valable jusqu'à la paroi et qui nécessite un maillage très fin (taille de maille inférieure à une unité de paroi) ;
- soit par l'utilisation d'un modèle de turbulence de type haut-Reynolds (figure 3), plus simple, couplé à une loi de paroi permettant de relier les flux pariétaux de quantité de mouvement τ_w et d'enthalpie q_w aux grandeurs évaluées par le code de calcul à la première maille (dont la taille est typiquement de l'ordre de la centaine d'unités de paroi).

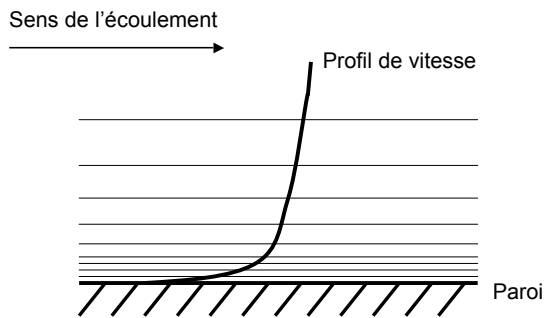


Fig. 2: Approche bas-Reynolds (lignes horizontales : maillage)

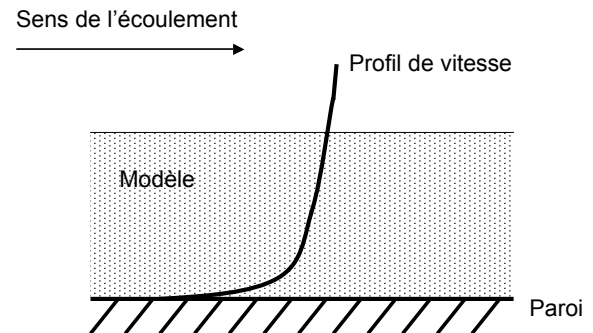


Fig. 3: Approche haut-Reynolds (lignes horizontales : maillage)

L'approche haut-Reynolds est souvent préférée dans l'industrie car :

- elle conduit à des temps de calcul inférieurs à ceux de l'approche bas-Reynolds puisque le maillage est plus grossier ;
- elle est compatible avec des méthodes numériques plus simples (l'approche bas-Reynolds n'est quant à elle pas viable sans méthode implicite efficace ou sans multi-grille) ;
- elle introduit moins de difficultés numériques puisque la zone pariétale de très forts gradients n'est pas calculée explicitement mais modélisée.

Cette étude vise à améliorer la prédiction des flux pariétaux par l'approche de type haut-Reynolds. Cela nécessite la définition de nouvelles lois de paroi capables de prendre en compte les spécificités des écoulements dans les moteurs-fusées : forts gradients de température, nombre de Mach potentiellement élevé, composition chimique variable et transfert de masse à la paroi dû à l'ablation.

Cette thèse s'articule autour de trois grandes parties, chacune d'elles étant scindée en plusieurs chapitres.

La **partie I** présente les bases sur lesquelles s'appuie ce travail de thèse.

Après avoir rappelé les caractéristiques principales de la turbulence, ainsi que quelques corrélations utilisées en turbulence pour évaluer des quantités pariétales, le **chapitre 1** expose trois approches numériques pour simuler des écoulements turbulents, chacune offrant un niveau de précision et un coût différents.

Le **chapitre 2** est consacré à la description et à la modélisation des écoulements turbulents sur paroi inerte. La structure de la couche limite turbulente, ainsi que les équations qui la régissent, sont ainsi détaillées. Les concepts de "loi de paroi" et "modèle de paroi" sont introduits. La dérivation des lois de paroi logarithmiques pour la vitesse et la température en situation isotherme est décrite. D'autre part, plusieurs approches de l'anisothermicité mises en œuvre dans diverses configurations sont présentées.

Le **chapitre 3** est consacré à la simulation numérique directe, et détaille par ailleurs les axes de recherche développés dans cette thèse.

Le **chapitre 4** s'intéresse à la modélisation des mélanges gazeux multi-espèces réactifs :

équations gouvernant de tels écoulements, diverses modélisations de la vitesse de diffusion multi-composant, modélisation de la cinétique chimique.

La **partie II** est consacrée aux simulations numériques directes (DNS) d'écoulements turbulents en canal plan tridimensionnel avec parois inertes isothermes, réalisées au cours de cette étude.

Le **chapitre 1** présente les DNS effectuées avec un mélange gazeux inerte (d'abord de l'air pour s'assurer que le code de calcul donne des résultats sains, puis un mélange composé de sept espèces gazeuses et dont le nombre de Prandtl moléculaire vaut 0.47). Les données ainsi obtenues conduisent à la dérivation d'une loi de paroi couplée vitesse-température qui tient compte des variations du nombre de Prandtl moléculaire (loi LMF-Pr).

Dans le **chapitre 2**, les DNS sont entreprises avec un mélange gazeux multi-espèce réactif et représentatif du mélange gazeux éjecté par un propulseur à propergol solide de Snecma Propulsion Solide. En particulier, cela requiert la mise au point d'un schéma cinétique capable de reproduire les changements de concentration rencontrés dans le propulseur de Snecma Propulsion Solide. D'autre part, le flux de chaleur résulte alors de deux contributions distinctes : celle liée au gradient de température, et celle liée au caractère multi-espèce du mélange gazeux (diffusion des espèces). Grâce à ces DNS, les effets sur le flux de chaleur pariétal et sur le frottement de l'hétérogénéité du mélange sont identifiés, et intégrés dans une loi de paroi couplée vitesse-température (loi LMF-Pr-chimie). Cette loi de paroi, valable pour des écoulements subsoniques, est étendue à des nombres de Mach élevés (loi LTM-chimie).

La **partie III** est quant à elle dédiée à l'analyse et à la simulation numérique du phénomène d'ablation des parois en carbone de la tuyère.

Le **chapitre 1** s'attache à décrire les mécanismes de contrôle de l'ablation, et donne les équations des bilans massique et énergétique de surface. Il décrit ensuite la condition limite d'ablation qui a été mise au point et implémentée dans le code de calcul AVBP, afin de simuler l'ablation des parois en carbone.

Le **chapitre 2** concerne la DNS d'écoulement turbulent gazeux multi-espèce réactif dans un canal plan tridimensionnel dont les parois isothermes en carbone sont ablatées. Grâce aux données générées par cette DNS, une première analyse des effets de l'ablation sur le flux de chaleur pariétal et sur le frottement est menée. Par ailleurs, les corrélations utilisées par Snecma Propulsion Solide pour évaluer le flux de masse pariétal ainsi que le flux de chaleur pariétal, sont comparées aux résultats fournis par la DNS. L'aspect "loi de paroi" est exploré, et des pistes concernant la dérivation d'une loi de paroi prenant en compte l'ablation des parois sont dégagées, et elles feront l'objet d'études ultérieures.

Première partie

Préambules et étude bibliographique

Chapitre 1

Turbulence

La majeure partie des écoulements rencontrés dans l'industrie sont de nature turbulente. C'est notamment le cas dans le secteur aéronautique : jet de propulsion des réacteurs, chambre de combustion, écoulement autour de missile ou d'aile d'avion, sillage des aubes de turbine, sont autant de configurations d'écoulements où règne la turbulence. Malgré la diversité de leurs manifestations, les écoulements turbulents regroupent un ensemble de propriétés communes.

1.1 Caractéristiques de la turbulence

Même si la définition générale et exhaustive de la turbulence reste à ce jour une question ouverte, les scientifiques s'accordent à reconnaître à la turbulence des propriétés intrinsèques distinctives et universelles ([13], [61], [6] et [89]).

L'évaluation du nombre de Knudsen Kn montre que la turbulence s'exerce à un niveau supra-moléculaire qui la place dans le domaine de la mécanique des milieux continus. Le nombre de Knudsen est défini par le rapport du libre parcours moyen λ_l des molécules du fluide à l'échelle de dissipation moléculaire l_η :

$$Kn = \frac{\lambda_l}{l_\eta} \quad (1.1)$$

Il est généralement admis qu'un milieu est continu lorsque $Kn < 0.01$. La théorie cinétique des gaz indique que la viscosité cinématique ν est le produit du libre parcours moyen par la vitesse d'agitation des molécules, vitesse du même ordre de grandeur que la célérité du son c ; par conséquent :

$$\lambda_l \sim \frac{\nu}{c} \quad (1.2)$$

D'autre part, l'équilibre entre forces d'inertie et de viscosité des plus petits mouvements d'agitation présents à l'échelle du continu se traduit par :

$$Re_\eta = \frac{l_\eta u_\eta}{\nu} \sim 1 \quad (1.3)$$

où u_η désigne l'échelle de vitesse associée à l_η .

En injectant les relations (1.2) et (1.3) dans la définition (1.1), le nombre de Knudsen relatif à l_η s'écrit alors :

$$\text{Kn} \sim \frac{\nu}{c} \frac{u_\eta}{\nu} \sim \frac{u_\eta}{c} \ll 1 \quad (1.4)$$

car la vitesse u_η est très petite devant la célérité du son, même pour des écoulements dont la vitesse moyenne est élevée.

Les équations de Navier-Stokes expriment un bilan de masse, de quantité de mouvement et d'énergie, dans le cadre de la mécanique des milieux continus. Elles sont considérées comme valables pour modéliser l'évolution de fluides en régime turbulent ([11], [13]). Dans le cas d'un gaz mono-espèce, homogène, compressible, et non soumis à des forces extérieures, les équations de Navier-Stokes sont données par les équations (1.5), (1.6) et (1.9).

Conservation de la masse :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (1.5)$$

ρ désigne la densité et (u_1, u_2, u_3) le champ de vitesse hydrodynamique.

Conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} \quad (1.6)$$

p désigne la pression thermodynamique.

Le tenseur visqueux τ_{ij} est défini par :

$$\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.7)$$

avec μ la viscosité dynamique et δ_{ij} le symbole de Kronecker¹.

Le tenseur visqueux et le tenseur de pression sont souvent combinés dans le tenseur σ_{ij} défini par :

$$\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij} = -p\delta_{ij} - \frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (1.8)$$

Conservation de l'énergie totale :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i e_t) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} u_i}{\partial x_j} \quad (1.9)$$

1

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

L'énergie totale e_t d'un gaz mono-espèce homogène est définie par :

$$e_t = \int_{T_0}^T C_v dT - \frac{RT_0}{W} + \Delta h_f^0 + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (1.10)$$

avec C_v la capacité calorifique à volume constant du gaz, T_0 la température de référence, Δh_f^0 l'enthalpie de formation du gaz à la température T_0 , W la masse molaire du gaz et R la constante des gaz parfaits ($R = 8.314 \text{ J}/(\text{mol.K})$).

Pour un gaz mono-espèce homogène, le flux de chaleur q_i est donné par :

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (1.11)$$

où λ désigne la conductivité thermique du gaz.

Un écoulement turbulent présente de fortes fluctuations du rotationnel de vitesse. D'autre part, la turbulence est tridimensionnelle et instationnaire. Signalons cependant qu'il existe une turbulence dite "bidimensionnelle", qui ne se rencontre que dans des situations très spécifiques² (turbulence atmosphérique, écoulements turbulents en forte rotation, par exemples) et dont les mécanismes diffèrent de ceux de la turbulence tridimensionnelle³.

En régime turbulent, les grandeurs physiques de l'écoulement varient de façon aléatoire. De plus, la non-linéarité des équations de Navier-Stokes confère aux champs turbulents un caractère imprévisible sur des temps très longs, qui correspond à une grande sensibilité aux conditions initiales et aux limites : c'est le caractère d'imprédictibilité. Malgré son apparence chaotique, l'écoulement turbulent d'un fluide visqueux est organisé en structures tourbillonnaires réparties sur une large gamme d'échelles spatiales et temporelles⁴. Les plus gros tourbillons, qui sont associés aux basses fréquences du spectre, sont déterminés par les conditions aux limites de l'écoulement et leur dimension est de l'ordre de grandeur du domaine occupé par l'écoulement. Les plus petits tourbillons, associés aux hautes fréquences, sont déterminés par les forces visqueuses. De par leur taille, les gros tourbillons interagissent avec l'écoulement moyen dont ils extraient de l'énergie cinétique, pour la donner aux agitations à grande échelle. Cette quantité d'énergie est transmise aux petits tourbillons, qui la dégradent en chaleur sous l'action de la viscosité moléculaire. C'est le processus de cascade énergétique. Tel n'importe quel écoulement visqueux, les écoulements turbulents sont donc toujours dissipatifs. Le passage de l'énergie à des échelles de plus en plus petites se fait par allongement des filets tourbillonnaires, les structures tourbillonnaires s'étirant les unes les autres.

²Pour qu'un écoulement turbulent soit bidimensionnel, il est nécessaire qu'une contrainte extérieure le force à rester bidimensionnel, sinon des instabilités se développent qui le rendent tridimensionnel.

³En particulier, il n'y a pas de cascade énergétique vers les petits tourbillons.

⁴On ne peut pas, en toute rigueur, lier chaque fréquence ou chaque nombre d'onde à une entité physique parfaitement définie. La notion de tourbillon doit donc garder un caractère conceptuel, son association systématique à une fréquence ou à un nombre d'onde étant abusive.

1.2 Paramètres de contrôle de la turbulence

Pour exprimer le fait que dans un écoulement les forces d'inertie l'emportent sur les forces de viscosité, un nombre de Reynolds convenablement choisi (*i.e.* construit sur une échelle de vitesse et une échelle de longueur représentatives de l'écoulement étudié) doit être supérieur à un certain seuil. Par exemple, *Reynolds* a déterminé expérimentalement le seuil d'apparition de la turbulence dans un écoulement en conduite [85] pour une valeur du nombre de Reynolds basé sur le diamètre de la conduite et la vitesse débitante supérieure à 2000 – 2500. Cette valeur peut s'élever à 10 000, voir même 70 000 si l'expérience est menée avec un écoulement d'alimentation parfaitement uniforme et des parois parfaitement lisses et isolées de toute vibration.

Cette valeur seuil du nombre de Reynolds ne s'obtient pas facilement car la turbulence demande un certain temps pour apparaître et une certaine distance pour se développer : c'est la phase de transition. Le passage d'un écoulement ordonné, en régime laminaire, à un écoulement complètement irrégulier, aléatoire, tridimensionnel et rotationnel, en régime turbulent, s'effectue à travers plusieurs étapes qui sont illustrées dans la figure 1.1, pour le développement d'une couche limite sur plaque plane sans gradient de pression.

Le nombre de Reynolds n'est toutefois pas le seul paramètre de contrôle pour caractériser la transition vers un écoulement turbulent. Par exemple, dans le cas des instabilités de Rayleigh-Bénard qui se développent dans un fluide contenu entre deux plaques parallèles de températures différentes, le paramètre de contrôle est le nombre de Rayleigh, défini par :

$$Ra = \frac{g\beta\Delta TL^3}{\nu a} \quad (1.12)$$

où g désigne l'accélération de la pesanteur, β le coefficient de dilatation thermique du fluide, ΔT l'écart de température entre les deux plaques, L la distance entre les deux plaques, ν la viscosité cinématique du fluide et $a = \lambda/(\rho C_p)$ sa diffusivité thermique. Le nombre de Rayleigh traduit le fait que le fluide chauffé au niveau de la plaque inférieure tend à s'élever sous l'effet de la poussée d'Archimède, mais que ce mouvement est freiné par la viscosité et les pertes de chaleur par conduction latérale, faisant que le fluide pourra atteindre ou non la paroi supérieure.

1.3 Quelques corrélations

La turbulence a des effets qui peuvent se révéler soit favorables, soit défavorables, selon les applications techniques envisagées. D'une façon générale, le transport de quantité de mouvement, de chaleur et de masse est plus efficace lorsque l'écoulement est turbulent, et la turbulence réduit les inhomogénéités cinématiques, thermiques et massiques au sein de l'écoulement. Cependant, cette efficacité accrue s'accompagne d'une augmentation des transferts pariétaux. Ce paragraphe fournit quelques corrélations permettant de quantifier l'effet de la turbulence sur les transferts pariétaux.

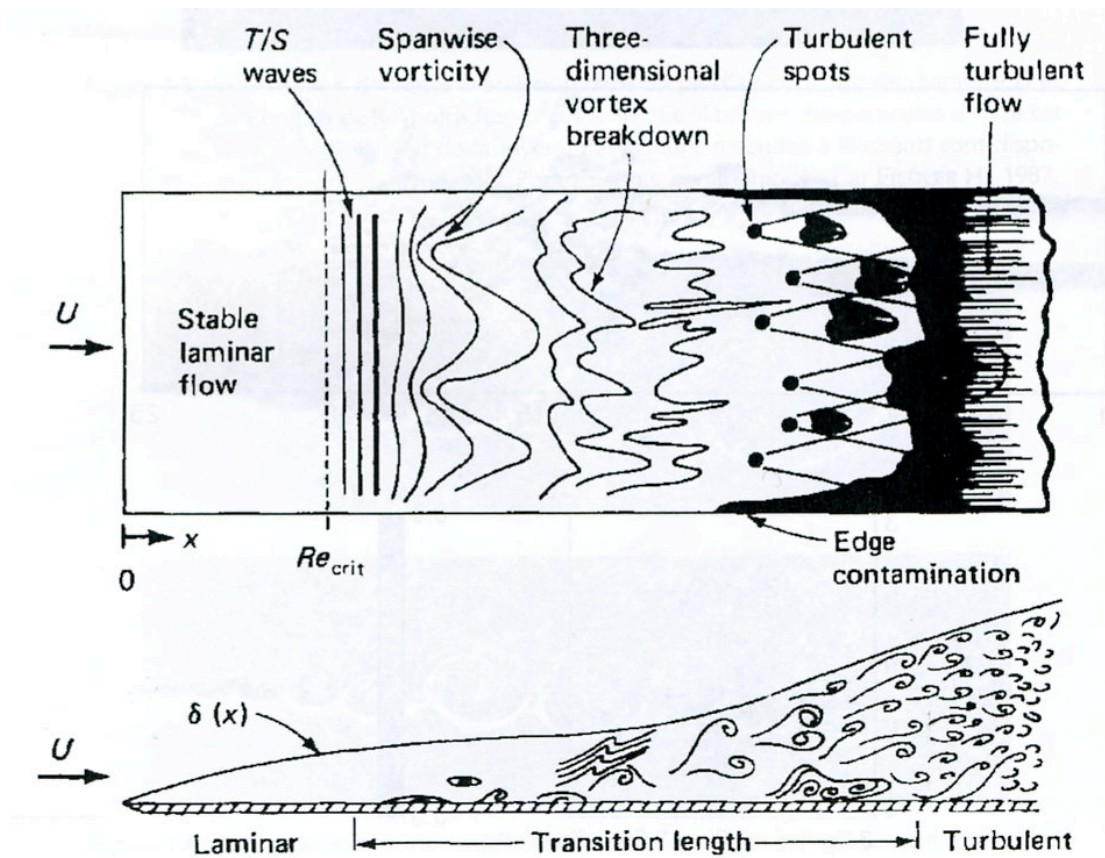


Fig. 1.1: Croquis, d'après White F. [104], de la transition d'une couche limite laminaire vers le régime turbulent pour une plaque plane sans gradient de pression : écoulement laminaire, ondes d'instabilité de Tollmien-Schlichting (T-S), évolution non linéaire et tridimensionnelle, formation de zones à rotationnel, apparition de bouffées turbulentes, turbulence pleinement développée.

1.3.1 Couche limite sur plaque plane

Le développement d'une couche limite sur plaque plane sans gradient extérieur de pression est guidé par le régime de l'écoulement. Cette couche limite s'épaissit vers l'aval, d'abord faiblement par diffusion visqueuse dans la zone laminaire, puis de façon beaucoup plus rapide sous l'effet des fluctuations latérales de vitesse dans la zone turbulente. Plus précisément, les expressions suivantes, fonction du nombre de Reynolds local $Re_x = U_\infty x / \nu$, indiquent l'épaisseur δ de cette couche limite selon la nature du régime de l'écoulement :

$$\delta \simeq 4.92 x Re_x^{-1/2} \quad \text{en régime laminaire} \quad (1.13)$$

$$\delta \simeq 0.37 x Re_x^{-1/5} \quad \text{en régime turbulent} \quad (1.14)$$

La relation (1.13) est déduite de la solution autosimilaire de Blasius [90], tandis que (1.14) est obtenue expérimentalement [90].

1.3.2 Augmentation des transferts thermiques

Le nombre de Nusselt local $Nu(x)$ est utilisé pour rendre compte des transferts thermiques pariétaux. Il s'exprime par :

$$Nu(x) = \frac{h(x)x}{\lambda} \quad (1.15)$$

où $h(x)$ désigne le coefficient local de transfert thermique par convection et λ la conductivité thermique du fluide.

Pour une couche limite sur plaque plane maintenue à température constante et sans gradient de pression, le nombre de Nusselt local est donné par des corrélations [13] dépendantes du nombre de Reynolds local $Re_x = U_\infty x / \nu$:

$$Nu(x) = 0.648 Pr^{1/3} Re_x^{1/2} \quad \text{en régime laminaire} \quad (1.16)$$

$$Nu(x) = 0.0366 Pr^{1/3} Re_x^{4/5} \quad \text{en régime turbulent} \quad (1.17)$$

où Pr représente le nombre de Prandtl moléculaire du fluide.

Pour un écoulement turbulent, le nombre de Nusselt local varie beaucoup plus rapidement avec Re_x , ce qui traduit des échanges thermiques plus importants.

Pour un gaz dont le nombre de Prandtl moléculaire est supérieur à 0.5 et qui s'écoule dans une conduite circulaire en régime turbulent, la corrélation ci-dessous (corrélation de Colburn) est très largement employée [7] :

$$Nu = 0.023 Re_D^{4/5} Pr^{1/3} \quad (1.18)$$

où Re_D désigne le nombre de Reynolds basé sur le diamètre D du tube. Cette corrélation est valide pour $2 \times 10^4 < Re_D < 10^6$.

Pour un tube non circulaire, D doit être remplacé par le diamètre hydraulique D_h . Dans le cas d'un canal plan tridimensionnel de demi-hauteur h dont les parois sont à températures constantes, la corrélation (1.18) s'écrit alors (toujours pour $Pr > 0.5$) :

$$Nu = 0.023 Re_{D_h}^{4/5} Pr^{1/3} \quad (1.19)$$

Dans le cas d'un canal plan tridimensionnel de demi-hauteur h , le diamètre hydraulique D_h est égal à $4h$.

Dans le cas d'un canal plan tridimensionnel de demi-hauteur h , de température de paroi T_w , et de température moyenne de fluide T_m , on a :

$$Nu = 2h \frac{q_w}{(T_m - T_w)} \frac{Pr}{\mu c_p} \quad (1.20)$$

Pour des écoulements présentant des écarts de températures importants, l'expérience montre que la corrélation (1.19) devient moins fiable. Une autre corrélation est proposée dans la littérature [42], [7] :

$$Nu = 0.027 Re^{4/5} Pr^{1/3} \left(\frac{\mu_m}{\mu_w} \right)^{0.14} \quad (1.21)$$

1.3.3 Augmentation des frottements pariétaux

En présence d'une paroi et en l'absence de décollement de l'écoulement, le frottement pariétal augmente nettement par rapport au cas laminaire, car la turbulence impose un brassage latéral intense, avec des profils de vitesse moyenne plus aplatis que le profil du régime laminaire. La contrainte pariétale τ_w est alors plus importante. Par conséquent, le coefficient local de frottement $C_f(x)$ défini par

$$C_f(x) = \frac{\tau_w(x)}{\frac{1}{2}\rho U_\infty^2} \quad (1.22)$$

est plus élevé.

En couche limite sur plaque plane, sans gradient de pression, $C_f(x)$ est fourni par les deux expressions semi-empiriques suivantes [13], fonction du nombre de Reynolds local $Re_x = U_\infty x / \nu$:

$$C_f(x) = 0.664 Re_x^{-1/2} \quad \text{en régime laminaire} \quad (1.23)$$

$$C_f(x) = 0.059 Re_x^{-1/5} \quad \text{en régime turbulent} \quad (1.24)$$

Pour un canal plan tridimensionnel avec profil de vitesse pleinement développé, on peut montrer [79] que le nombre de Reynolds (basé sur l'espacement entre les deux parois et sur la vitesse débitante suivant la direction longitudinale) et le coefficient de frottement suivent approximativement la relation :

$$Re = 2\sqrt{2/C_f} \exp \left[1 + \kappa \left(\sqrt{2/C_f} - B - B_1 \right) \right] \quad (1.25)$$

où $C_f = \tau_w / (\frac{1}{2}\rho \bar{U}^2)$ désigne le coefficient de frottement et \bar{U} la vitesse débitante suivant la direction longitudinale. Les constantes B et B_1 sont déterminées expérimentalement et sont en général proche de [79] :

$$B = 5.2 \quad B_1 = 0.7$$

1.4 Simulation numérique de la turbulence

Pour le calcul prédictif des écoulements turbulents, trois types d'approche se dessinent, chacune correspondant à un niveau de description différent (*cf* croquis de la figure 1.2). Cependant, ces approches sont plus complémentaires que concurrentes, car le choix d'une méthode de résolution numérique des équations de Navier-Stokes est conditionné par de nombreux critères, tels la facilité de mise en oeuvre, le coût, la performance, le degré de généralité, la souplesse d'utilisation ...

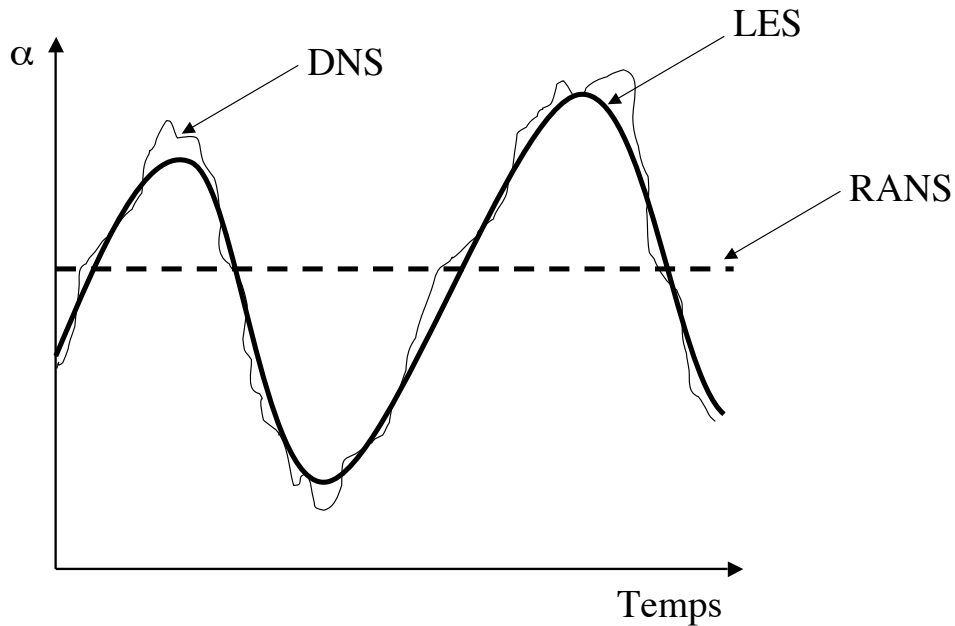


Fig. 1.2: Comparaison des approches RANS, LES et DNS

1.4.1 Les méthodes RANS (Reynolds-Averaged Navier-Stokes)

Une approche statistique, basée sur la décomposition en champs moyen et fluctuant introduite par Reynolds, a longtemps prévalu pour le calcul des écoulements turbulents à nombre de Reynolds élevé. Toute quantité α s'écrit alors sous la forme $\alpha = \bar{\alpha} + \alpha'$, où $\bar{\cdot}$ désigne l'opérateur de moyenne statistique (moyenne sur un ensemble de réalisations). Cette moyenne vérifie les règles dites "règles de Reynolds" [38] :

$$\overline{f + g} = \bar{f} + \bar{g} \quad (1.26)$$

$$\overline{af} = a\bar{f} \quad (1.27)$$

$$\overline{fg} = \bar{f}\bar{g} \quad (1.28)$$

$$\overline{\frac{\partial f}{\partial \zeta}} = \frac{\partial \bar{f}}{\partial \zeta} \quad (1.29)$$

où f et g sont deux fonctions, a une constante numérique et ζ une variable de temps ou d'espace.

Dans le cas d'une turbulence stationnaire, la moyenne d'ensemble ne dépend pas du temps et l'hypothèse d'ergodicité⁵ permet alors de dire que la moyenne temporelle est égale à la moyenne d'ensemble. On pourra de même utiliser des moyennes spatiales dans les directions

⁵D'un point de vue statistique, il est équivalent de considérer la répétition d'expérience analogue ou une seule expérience indéfiniment prolongée.

où l'écoulement est homogène⁶.

La description statistique des écoulements à densité variable est un thème de recherche d'actualité [14]. Pour de tels écoulements, la moyenne de Favre est mieux adaptée que la moyenne de Reynolds. La moyenne de Favre d'une quantité α est notée $\tilde{\alpha}$ et elle est définie par :

$$\tilde{\alpha} = \frac{\overline{\rho\alpha}}{\bar{\rho}} \quad (1.30)$$

La décomposition en quantités moyenne et fluctuante s'écrit alors $\alpha = \tilde{\alpha} + \alpha''$. La moyenne de Favre vérifie les propriétés suivantes :

$$\widetilde{f + g} = \tilde{f} + \tilde{g} \quad (1.31)$$

$$\widetilde{af} = a\tilde{f} \quad (1.32)$$

$$\widetilde{fg} = \tilde{f}\tilde{g} \quad (1.33)$$

où f et g sont deux fonctions, a une constante numérique et ζ une variable de temps ou d'espace.

Le traitement statistique des équations de Navier-Stokes (méthodes RANS) fait apparaître des termes inconnus qui sont interprétés comme des tensions turbulentes. Il s'agit de corrélations d'ordre deux, appelées tensions de Reynolds, qui proviennent de la partie non linéaire des équations de Navier-Stokes et qui traduisent l'interaction entre mouvement moyen et mouvement fluctuant. Ces corrélations doivent être modélisées afin de fermer le jeu d'équations obtenu.

Toutes les échelles de la turbulence étant modélisées, l'approche RANS se satisfait d'un maillage grossier et bénéficie d'une rapidité de calcul qui la rend très attractive pour le secteur industriel car elle s'intègre facilement dans un processus de conception et de fabrication. Toutefois, elle ne permet pas de traiter les écoulements non stationnaires (qui constituent pourtant la majorité des écoulements rencontrés dans l'industrie) et fournit des informations uniquement sur la dynamique du champ moyen de l'écoulement. Par ailleurs, les modèles de fermeture manquent d'universalité car l'ajustement des constantes se fait en fonction de la géométrie et de l'écoulement considéré. Les méthodes RANS ont connu des développements importants (modélisation au second ordre, modélisation multi-échelle, par exemples). Elles font aujourd'hui partie du domaine public et sont largement utilisées dans les logiciels commerciaux de mécanique des fluides numérique.

Afin de tenir compte du caractère non stationnaire de certains écoulements, des approches RANS non stationnaires (U-RANS pour "Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes" et DES⁷ pour "Detached Eddy Simulation") ont été développées. Elles permettent de capter

⁶Pour une turbulence stationnaire et homogène, les moyennes statistique, temporelle et spatiale sont équivalentes (hypothèse d'ergodicité).

⁷Estimant que la LES (cf sous-section 1.4.3) ne permettrait pas une prédiction viable d'écoulements industriels à haut nombre de Reynolds avant trois ou quatre décennies [98], Spalart a proposé, pour les écoulements séparés, un modèle hybride [97] qui utilise une formulation RANS dans les régions où la couche limite est attachée, et qui applique un modèle de type LES là où l'écoulement est détaché. Cette approche, appelée DES, a depuis montré des résultats prometteurs pour des écoulements techniques [92].

une partie des instationnarités de l'écoulement dues soit à des instabilités hydrodynamiques (couches de mélange, sillage, ...), soit à des phénomènes transitoires (injection à un instant donné). Même si ces approches offrent un bon compromis entre généralité des modélisations, restitution et précision des résultats, elles ne peuvent pas déterminer certaines grandeurs d'intérêt, telles les fréquences caractéristiques d'instabilités présentes dans l'écoulement, l'amplitude de fluctuations de pression ou de température.

1.4.2 La Simulation Numérique Directe

C'est essentiellement dans les années soixante-dix que les progrès des ordinateurs ont permis d'envisager un autre type d'approche : la Simulation Numérique Directe (ou DNS pour "Direct Numerical Simulation"). La DNS ne fait appel à aucun modèle de turbulence pour résoudre les équations de Navier-Stokes. Elle doit donc être capable de traiter l'intégralité de la vaste gamme d'échelles spatio-temporelles présentes dans un écoulement turbulent. Une telle approche nécessite un maillage extrêmement raffiné afin de capturer les plus petites structures de l'écoulement, ce qui la rend très coûteuse en temps de calcul. Pour donner un ordre d'idée du nombre de noeuds de maillage nécessaire pour effectuer une DNS, intéressons nous aux échelles de la turbulence.

Deux échelles extrêmes sont retenues pour caractériser un écoulement turbulent :

- l'échelle de longueur intégrale de la turbulence L_i , qui représente la taille des plus grandes structures énergétiques de l'écoulement turbulent (on admet que L_i est fixée par la dimension de l'objet macroscopique générant ces structures) ;
- l'échelle de Kolmogorov l_η , qui correspond à l'échelle des plus petites structures dissipatives.

La quantité d'énergie du mouvement moyen injectée dans le mouvement turbulent est déterminée par la taille des grandes structures : seule cette quantité d'énergie pourra être transmise aux petites structures à travers la cascade énergétique, puis dissipée. Le taux de dissipation ϵ de l'énergie cinétique turbulente k est donc entièrement contrôlé par les mouvements à grande échelle, bien que la dissipation soit un processus visqueux. Pour des nombres de Reynolds élevés, une analyse dimensionnelle confirmée par des mesures expérimentales suggère que l'échelle de longueur intégrale L_i peut s'écrire sous la forme :

$$L_i \simeq \frac{k^{3/2}}{\epsilon} \quad (1.34)$$

car le montant d'énergie dissipé par les grandes échelles est absorbé par les petites échelles. La taille des plus petites structures est donnée par le taux auquel elles dissipent l'énergie cinétique turbulente qui leur est transmise par les grandes structures, à travers la cascade énergétique. Leur mode d'action étant dissipatif, c'est la viscosité qui fixe la taille des plus petites d'entre-elles. Pour l'échelle de Kolmogorov l_η , une analyse dimensionnelle conduit à :

$$l_\eta \simeq \frac{\nu^{3/4}}{\epsilon^{1/4}} \quad (1.35)$$

Ainsi, le rapport des plus grandes échelles aux plus petites varie comme :

$$\frac{L_i}{l_\eta} \simeq \left(\frac{k^{1/2} L_i}{\nu} \right)^{3/4} \equiv Re_t^{3/4} \quad (1.36)$$

où la quantité Re_t désigne le nombre de Reynolds de la turbulence et peut être vue comme le nombre de Reynolds caractéristique des grandes échelles de la turbulence.

Le rapport (1.36) indique que le spectre des fréquences (spatiales ou temporelles) rencontrées dans un écoulement turbulent augmente comme la puissance 3/4 du nombre de Reynolds de la turbulence. Dans une DNS, toutes les échelles devant être résolues, le nombre de points de discrétisation dans une direction donnée de l'espace s'accroît lui aussi comme $Re_t^{3/4}$. La turbulence étant tridimensionnelle, le nombre total de noeuds est proportionnel à $Re_t^{9/4}$.

La DNS requiert donc de puissants moyens informatiques et se trouve limitée par les capacités des micro-processeurs, ce qui la restreint actuellement à des configurations simples, académiques et à faible nombre de Reynolds, et exclut les configurations industrielles.

1.4.3 La Simulation des Grandes Echelles

Afin d'atteindre des nombres de Reynolds plus élevés tout en conservant une description quasi instantanée de l'essentiel du champ turbulent, la méthode dite de "Simulation des Grandes Echelles" (ou LES pour "Large Eddy Simulation") a été développée ([64], [62]). Elle est basée sur une séparation des échelles, qui s'effectue grâce à un filtre appliqué aux équations de Navier-Stokes et de largeur proportionnelle au pas d'espace du maillage. Les échelles dont la taille est inférieure à la largeur de ce filtre sont appelées échelles de sous-maille et doivent être modélisées, tandis que celles dont la taille est supérieure à la largeur du filtre sont résolues par l'algorithme numérique. Les termes de sous-maille, apparus avec le filtrage, traduisent l'action des petites échelles sur les grands tourbillons. La LES est fondée sur l'observation suivante : les grands tourbillons sont très différents selon les géométries, leur structure variant considérablement avec le type de l'écoulement, alors que les petits tourbillons ont un caractère beaucoup plus universel. Ces derniers seront donc plus faciles à modéliser (universalité et isotropie des petites échelles) et on considère que l'essentiel de la spécificité de l'écoulement est pris en compte par le champ simulé.

La modélisation des termes de sous-maille a fait l'objet d'un grand nombre d'études, qui ne seront pas résumées ici ; pour une description détaillée de la méthodologie LES, le lecteur pourra se référer à l'ouvrage [88], par exemple. Pour la majorité d'entre-eux, les modèles de sous-maille sont basés sur l'hypothèse de Boussinesq, qui lie le tenseur des contraintes non résolues au tenseur des vitesses de déformation, par l'intermédiaire d'une viscosité turbulente. Le modèle de sous-maille doit ainsi expliciter cette viscosité turbulente. Le modèle de Smagorinski [94], le modèle de Smagorinski filtré, le modèle WALE [72] ainsi que le modèle dynamique de Germano [34], constituent les modèles de sous-maille les plus utilisés.

La LES ne connaît pas une limitation en nombre de Reynolds aussi drastique que pour la DNS, au moins en l'absence de phénomènes pariétaux importants, ce qui lui permet de

s'attaquer à des configurations industrielles d'écoulement, et en fait une méthode certes coûteuse en temps de calcul, mais pas inabordable. De plus, tout comme la simulation numérique directe (peut-être dans une moindre mesure puisqu'elle contient des termes modélisés), la LES sert d'outil de référence dans l'étude de la turbulence. En particulier, la plupart des modèles de turbulence classiques ayant été proposés pour des nombres de Reynolds élevés, la seule confrontation avec la DNS ne suffit pas à leur validation.

Chapitre 2

Physique et modélisation des écoulements sur paroi inerte

Dans les simulations numériques, la prescription des conditions aux limites pour les parois solides apparaît comme un point délicat en raison du coût élevé nécessaire à la résolution numérique de la couche limite. Par conséquent, une connaissance précise et détaillée de la physique des écoulements pariétaux est indispensable pour établir des modèles performants, qui allègeront le coût des simulations LES et RANS haut-Reynolds, et amélioreront leur précision.

Ce chapitre s’attache à décrire la physique des écoulements pariétaux turbulents, et présente les modèles de paroi existants pour de tels écoulements, en situation quasi isotherme, puis anisotherme.

2.1 La couche limite turbulente

Le terme de “couche limite” a été introduit et proposé par *Prandtl* au début du XX^{ème} siècle, suite à ses études d’écoulement de l’air au voisinage d’une plaque [80] :

“Experience has shown that the motion of a fluid of small viscosity (water or air) around a body has velocities of the same order of magnitude as the velocity at infinity in practically the whole region with the exception of a thin layer surrounding the body.”

Cette observation a été le point de départ de nombreux développements qui ont permis de progresser dans la compréhension et la modélisation des écoulements pariétaux faiblement visqueux¹.

On s’intéresse ici au cas d’une couche limite turbulente.

¹La présence d’une couche limite est caractéristique d’un écoulement faiblement visqueux. Par “faiblement visqueux”, on entend que, loin des bords du domaine, les effets visqueux sont faibles devant ceux des autres forces régissant l’écoulement.

2.1.1 Structure de la couche limite turbulente

L'une des principales caractéristiques d'une couche limite turbulente est l'existence d'une zone adjacente à la paroi, où les principales variables moyennes de l'écoulement (vitesse, température, énergie cinétique turbulente) présentent de forts gradients spatiaux. Les mesures expérimentales montrent que l'épaisseur de cette zone à forts gradients est très faible devant l'épaisseur caractéristique δ de la couche limite.

Si l'on considère le cas d'une couche limite stationnaire, quasi isotherme (faibles gradients de température) et avec un gradient de pression longitudinal négligeable (écoulement dans une conduite, par exemple), la structure de cette couche limite est surtout déterminée par la diffusion transversale, qui prime sur la diffusion longitudinale et la convection. Selon la nature du transport diffusif, deux zones peuvent alors être distinguées dans la couche limite turbulente [36], [49] (figure 2.1) :

- **la zone externe** : l'écoulement y est pleinement turbulent, et les tourbillons porteur d'énergie assurent l'essentiel des transports diffusifs, les phénomènes de transport moléculaires étant négligeables ($Re_t \gg 1$). Les échelles caractéristiques d'espace, de vitesse et de température sont respectivement l'épaisseur de la couche limite δ , la vitesse U_∞ et la température T_∞ à l'extérieur de la couche limite ;
- **la zone interne** : très mince au regard de la zone externe, et adjacente à la paroi, cette zone est le siège de très forts gradients, ce qui modifie les caractéristiques de la turbulence par rapport à celles de la zone externe :
 - *coupure des échelles turbulentes* : les tourbillons dont la taille caractéristique est supérieure à leur distance à la paroi ne peuvent subsister ;
 - *adhérence à la paroi* : les fluctuations de vitesse sont amorties. Cet amortissement induit en outre une anisotropie de l'agitation turbulente, car la composante transversale de vitesse est amortie plus fortement que les composantes longitudinales.

Dans cette zone, on a donc $u' \rightarrow 0$ et $L \sim y$, de sorte que $Re_t \rightarrow 0$. Le transport turbulent perd en importance par rapport au transport moléculaire à mesure que l'on s'approche de la paroi, et il devient négligeable en son voisinage immédiat.

Sous certaines hypothèses, la structure fine de la zone interne est indépendante de l'écoulement dans la zone externe, ce qui se traduit par l'existence de lois de paroi dynamique et thermique. Ce caractère quasi universel de la zone interne peut alors être mis à profit pour le développement de modèles de paroi.

2.1.2 Structure de la zone interne

En fonction de l'importance relative des phénomènes de transports diffusifs turbulents et moléculaires, la zone interne peut, elle aussi, être divisée en trois sous-couches (figure 2.1) :

- **la sous-couche visqueuse** : dans cette zone adjacente à la paroi, les phénomènes de transport turbulent sont négligeables face aux phénomènes moléculaires. Les profils

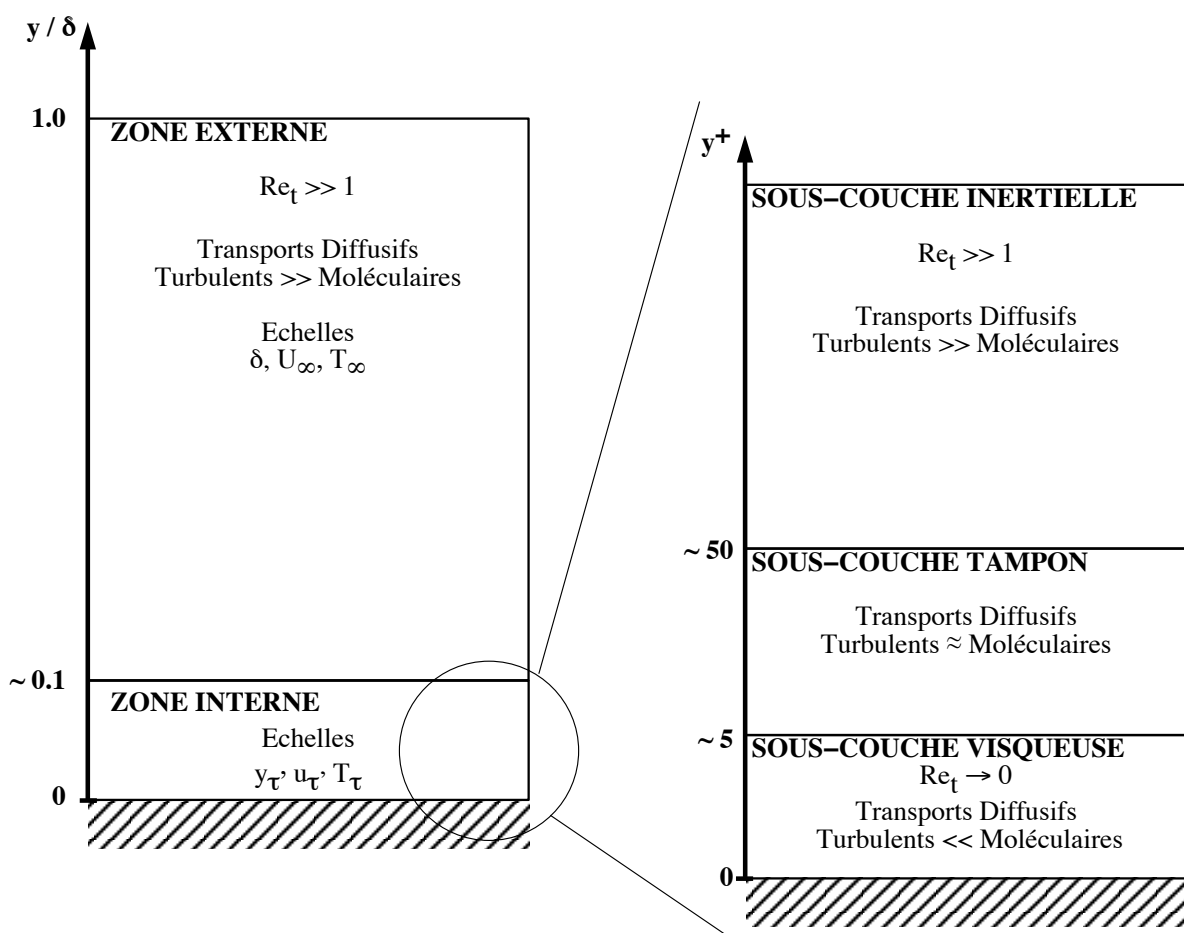


Fig. 2.1: Structure d'une couche limite pariétale turbulente quasi isotherme

de vitesse et de température moyennes dans cette sous-couche correspondent à des profils laminaires ;

- **la sous-couche inertielle** : dans cette zone située à la limite extérieure de la zone interne, le transport diffusif moléculaire est négligeable par rapport au transport diffusif turbulent ;
- **la sous-couche tampon** : dans cette zone de transition entre les deux précédentes, les transports diffusifs moléculaires et turbulents sont du même ordre de grandeur.

Une analyse dimensionnelle montre qu'une échelle de longueur caractéristique de la zone interne peut être définie par

$$y_\tau = \nu_w / u_\tau \quad (2.1)$$

où u_τ est la vitesse de frottement (définie par l'équation (2.9)).

Une variable adaptée à la description de la zone interne est alors :

$$y^+ = y / y_\tau \quad (2.2)$$

Les mesures expérimentales [90] indiquent que les sous-couches où la diffusion moléculaire joue un rôle s'étendent de la paroi à $y^+ \approx 50$. Cette zone est partagée entre la sous-couche visqueuse qui s'étend de la paroi à $y^+ \approx 5$, et la zone tampon. La sous-couche inertielle occupe le reste de la zone interne. Si la structure de cette sous-couche est également indépendante de l'écoulement dans la zone externe, sa limite extérieure est d'autant plus grande que le Reynolds de l'écoulement externe est grand [49].

2.1.3 Equations de la zone interne

Considérons une couche limite pariétale turbulente se développant selon la coordonnée x . Soient y la coordonnée transversale et u (resp. v) la vitesse instantanée longitudinale (resp. transversale).

Hypothèses simplificatrices

Les hypothèses simplificatrices suivantes sont introduites :

1. Convection transversale négligeable par rapport à la convection longitudinale
2. Gradients longitudinaux négligeables par rapport aux gradients transversaux
3. Paroi plane, lisse, à température constante T_w
4. Ecoulement pleinement turbulent, stationnaire en moyenne
5. Gradient de pression longitudinal moyen nul
6. Vitesses d'écoulement faibles (Mach faible, *i.e.* énergie de dissipation visqueuse négligeable)
7. Pas de réactions chimiques (*i.e.* pas de dégagement de chaleur)
8. Gaz parfaits
9. Effet Dufour (thermo-diffusion) et effet Soret (interdiffusion d'espèces) négligeables
10. Convection naturelle négligeable
11. Flux radiatifs négligeables
12. Pas de forces extérieures

Les hypothèses 1 et 2 découlent directement de la faible épaisseur de la zone interne et des importants gradients transversaux qui y règnent. L'hypothèse de flux radiatifs négligeables est approximativement vérifiée dans les tuyères. Les autres hypothèses servent à simplifier les équations de quantité de mouvement et d'enthalpie moyennes dans la zone interne. Celles-ci s'écrivent alors en utilisant des moyennes de Favre² :

$$0 = \frac{d}{dy} \left(\mu \frac{d\bar{u}}{dy} - \bar{\rho} \widetilde{u''v''} \right) \quad (2.3)$$

$$0 = \frac{d}{dy} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{d\bar{T}}{dy} - \bar{\rho} \widetilde{v''T''} \right) \quad (2.4)$$

²Les fluctuations de viscosité et de conductivité moléculaires, ainsi que de la capacité calorifique à pression constante du gaz, dues aux fluctuations de température ont été négligées ($\mu' = \lambda' = C_p' = 0$ et $\bar{\mu} \approx \mu(\bar{T})$, $\bar{\lambda} \approx \lambda(\bar{T})$ et $\bar{C}_p \approx C_p(\bar{T})$).

avec les conditions aux limites à la paroi $\bar{u}(y=0) = 0$ et $\bar{T}(y=0) = T_w$.

Par analogie aux flux moléculaires, les flux turbulents de quantité de mouvement et de température sont modélisés selon l'hypothèse de Boussinesq par :

$$-\bar{\rho} \widetilde{u''v''} = \mu_t \frac{d\bar{u}}{dy}, \quad \text{et} \quad -\bar{\rho} \widetilde{v''T''} = \frac{\lambda_t}{C_p} \frac{d\bar{T}}{dy} \quad (2.5)$$

en introduisant la viscosité turbulente μ_t et la conductivité turbulente λ_t .

Les équations (2.3) et (2.4) peuvent alors être intégrées une première fois à partir de la paroi, pour obtenir :

$$(\mu + \mu_t) \frac{d\bar{u}}{dy} = \tau_w \quad (2.6)$$

$$-(\lambda + \lambda_t) \frac{d\bar{T}}{dy} = q_w \quad (2.7)$$

avec pour frottement pariétal et flux de chaleur pariétal :

$$\tau_w = \mu_w \left(\frac{d\bar{u}}{dy} \right)_{y=0}, \quad \text{et} \quad q_w = -\lambda_w \left(\frac{d\bar{T}}{dy} \right)_{y=0} \quad (2.8)$$

Les équations (2.6) et (2.7) montrent que sous les hypothèses précédentes, la somme des contraintes laminaires et turbulentes est constante dans la zone interne de la couche limite, fait confirmé expérimentalement ([90]).

Adimensionnement

Afin d'adimensionner les équations (2.6) et (2.7), une vitesse, resp. une température, de frottement sont introduites et définies par :

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}}, \quad \text{resp.} \quad T_\tau = \frac{q_w}{\rho_w C_p u_\tau} \quad (2.9)$$

Ces deux grandeurs sont des échelles caractéristiques des fluctuations de vitesse, resp. de température, dans la zone interne de la couche limite. Les variables adimensionnelles décrivant l'écoulement de proche paroi sont alors :

$$\begin{aligned} y^+ &= y/y_\tau & u^+ &= \bar{u}/u_\tau & T^+ &= -(\bar{T} - T_w)/T_\tau \\ \mu^+ &= \mu/\mu_w & \mu_t^+ &= \mu_t/\mu_w \\ \lambda^+ &= \lambda/(\mu_w C_p) & \lambda_t^+ &= \lambda_t/(\mu_w C_p) \\ \rho^+ &= \bar{\rho}/\rho_w \end{aligned} \quad (2.10)$$

avec

$$y_\tau = \nu_w/u_\tau \quad (2.11)$$

Les équations (2.6) et (2.7) deviennent, sous forme adimensionnelle,

$$(\mu^+ + \mu_t^+) \frac{du^+}{dy^+} = 1 \quad (2.12)$$

$$(\lambda^+ + \lambda_t^+) \frac{dT^+}{dy^+} = 1 \quad (2.13)$$

avec les conditions aux limites

$$\begin{aligned} u^+|_{y^+=0} &= 0 & \left. \frac{du^+}{dy^+} \right|_{y^+=0} &= 1 \\ T^+|_{y^+=0} &= 0 & \left. \frac{dT^+}{dy^+} \right|_{y^+=0} &= Pr \end{aligned} \quad (2.14)$$

où $Pr = \mu C_p / \lambda$ est le nombre de Prandtl moléculaire (pour l'air $Pr = 0.7$).

La résolution de ce système d'équations différentielles est fonction de la modélisation des termes de viscosité et de conductivité turbulentes μ_t^+ et λ_t^+ , mais aussi de la dépendance des propriétés thermodynamiques du gaz μ^+ et ρ^+ à la température moyenne.

2.1.4 Le paramètre d'isothermicité

L'existence d'un gradient de température transversal à la paroi dans une couche limite induit que les propriétés thermodynamiques du fluide présentent également un gradient transversal. Si on suppose un gaz parfait proche de l'air, la dépendance des propriétés du gaz à la température s'écrit, en unités pariétales³ :

$$\mu^+ = (1 - B_q T^+)^b, \quad \lambda^+ = \mu^+ / Pr, \quad \text{et} \quad \rho^+ = (1 - B_q T^+)^{-1} \quad (2.15)$$

où la dépendance de la viscosité moléculaire à la température a été approchée par la loi puissance $\mu/\mu_w = (T/T_w)^b$, avec $b = 0.76$ pour l'air. La capacité calorifique du gaz est supposée indépendante de la température.

Ces équations font apparaître le paramètre d'isothermicité de la couche limite B_q , défini par :

$$B_q = \frac{T_\tau}{T_w} = \frac{q_w}{\rho_w C_p u_\tau T_w} \quad (2.16)$$

De façon équivalente, ce paramètre peut être interprété soit comme une échelle caractéristique du rapport de température entre le gaz et la paroi, soit comme une échelle caractéristique du flux de chaleur pariétal. On montre facilement que :

$$T^+ = \frac{1}{B_q} \left(1 - \frac{T}{T_w} \right) \quad (2.17)$$

Dans le cas limite $B_q \rightarrow 0$, le flux de chaleur pariétal est négligeable. La température adimensionnelle T^+ gardant une valeur finie, la relation (2.17) indique que dans ce cas

³Rappelons que du fait des hypothèses décrites plus haut, la pression dans la couche limite est constante.

$T \rightarrow T_w$. Autrement dit, le gradient de température dans la couche limite peut être négligé, et les propriétés thermodynamiques du gaz peuvent être considérées comme constantes : $\rho^+ = \mu^+ = 1$. La température peut alors être considérée comme un scalaire passif. Ce cas de la couche limite quasi isotherme est le domaine de validité des lois de paroi classiques (confer section 2.3).

Par contre, lorsque B_q n'est plus asymptotiquement faible, le flux de chaleur pariétal n'est plus négligeable, de sorte que \bar{T} , et donc μ et ρ , dans la couche limite ne peuvent plus être considérées comme constantes. La température n'est plus un scalaire passif car elle influe directement sur la structure de l'écoulement. Ce cas d'une couche limite anisotherme correspond à l'écoulement de gaz très chauds près d'une paroi refroidie, comme on le rencontre par exemple dans les moteurs de fusée [69]. L'application des lois de paroi classiques à des écoulements anisothermes n'est *a priori* pas justifiée, vu que celles-ci ont été développées sous l'hypothèse d'une couche limite quasi isotherme.

2.2 Calcul des flux pariétaux et modèles de paroi

La méthode choisie pour évaluer les dérivées à la paroi conditionne la qualité des résultats obtenus. La manière la plus simple d'évaluer les flux pariétaux est certainement l'utilisation de corrélations entre nombres caractéristiques de l'écoulement (nombre de Reynolds Re , nombre de Prandtl moléculaire Pr , coefficient de frottement C_f , ...) (cf section 1.3 de la partie I). De telles relations permettent d'obtenir facilement des résultats intéressants, mais elles manquent de généralité. Il est en effet nécessaire de déterminer des corrélations pour chaque type d'écoulement, les constantes étant fixées empiriquement. Si elles s'avèrent très utiles dans le cadre d'une approche de type ingénieur, pour des pré-dimensionnements, ces corrélations entre nombres adimensionnés ne permettent pas une meilleure compréhension de la physique de l'écoulement, contrairement à la résolution numérique des équations en proche paroi. A moyen terme, l'évaluation des flux pariétaux se fait au moyen de codes de calcul résolvant les équations de la mécanique des fluides. Dans la mesure où les écoulements turbulents sont caractérisés par de forts gradients des grandeurs moyennes au voisinage des parois, leur simulation numérique requiert un maillage extrêmement raffiné près des parois. Ceci conduit à préférer l'approche RANS haut-Reynolds, afin d'éviter tout problème d'ordre numérique et de réduire le temps de calcul. Les équations qui régissent l'écoulement ne sont alors résolues que dans les zones suffisamment éloignées des parois, tandis que des lois de paroi interviennent pour relier les grandeurs de la première cellule de calcul aux grandeurs pariétales.

Si le terme "loi de paroi" ne concerne à l'origine que les relations analytiques donnant les profils de vitesse et de température dans la zone interne d'une couche limite, il a pris un sens plus général dans un contexte de simulations numériques RANS haut-Reynolds avec modèle de turbulence $k - \varepsilon$. La "loi de paroi" désigne alors l'ensemble des relations permettant de déterminer les flux pariétaux de mouvement τ_w et d'enthalpie q_w , et de fixer des valeurs représentatives pour k et ε dans une cellule pariétale sans résoudre le proche voisinage de la paroi. Afin d'éviter toute confusion, le terme "modèle de paroi" est utilisé

pour désigner ces relations, celui de “loi de paroi” conservant son sens initial.

La dérivation générale des lois de paroi présentées ultérieurement dans cette étude suit les étapes ci-dessous :

- les équations du mouvement sont simplifiées en ne conservant que les termes prépondérants, puis elles sont intégrées dans la direction normale à la paroi ;
- la turbulence est prise en compte par la viscosité turbulente μ_t , à l’aide d’un modèle de type longueur de mélange.

Pour simplifier les choses, on considère généralement les variations de la masse volumique et des propriétés de transport du fluide avec la température comme négligeables. On suppose ainsi que le flux de chaleur pariétal est faible. De fait, l’application de telles lois de paroi à des situations fortement anisothermes, telles l’éjection des gaz de propulsion des moteurs-fusées à propergol solide, n’est pas justifiable *a priori*.

La figure 2.2 illustre le mode de fonctionnement des modèles de paroi (dans le cas d’une approche RANS haut-Reynolds avec modèle de turbulence $k - \varepsilon$).

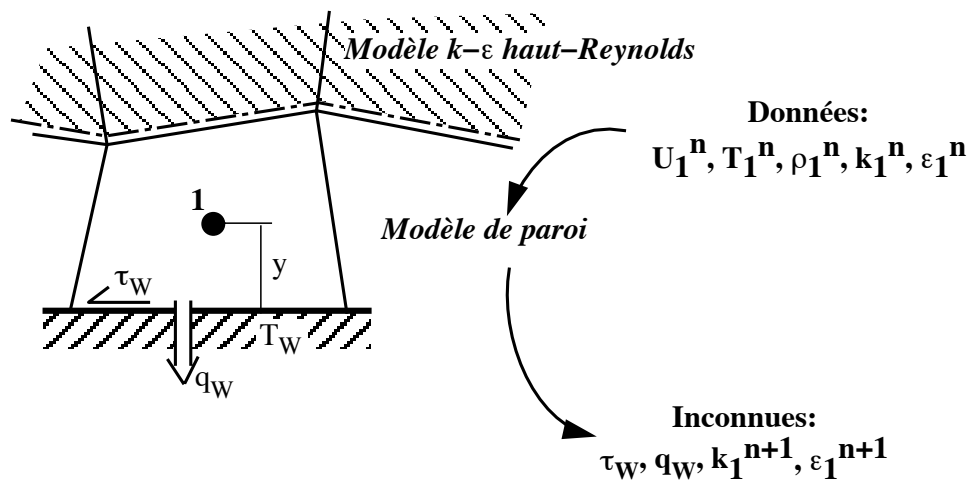


Fig. 2.2: Principe des modèles de paroi

Rappelons que le domaine de résolution du modèle $k - \varepsilon$ ne concerne que les cellules fluides ne comportant pas de facettes pariétales. À partir de la connaissance des variables de l’écoulement à l’instant n dans une cellule pariétale (indice 1), le modèle de paroi permet de déterminer :

- les flux pariétaux (utilisés pour le bilan de quantité de mouvement et d’énergie interne sur la cellule pariétale) ;
- les valeurs de l’énergie cinétique turbulente k_1^{n+1} et de son taux de dissipation ε_1^{n+1} au prochain pas de temps.

2.3 Modèles de paroi pour le cas quasi isotherme

Les modèles de paroi classiques ont été développés et validés pour des couches limites quasi isothermes, *i.e.* pour le cas limite $B_q \rightarrow 0$. Les équations (2.12) et (2.13) peuvent alors être simplifiées en supposant des propriétés thermodynamiques du gaz constantes $\rho^+ = \mu^+ = 1$, pour obtenir :

$$(1 + \mu_t^+) \frac{du^+}{dy^+} = 1 \quad (2.18)$$

$$\left(\frac{1}{Pr} + \lambda_t^+\right) \frac{dT^+}{dy^+} = 1 \quad (2.19)$$

L'intégration de ces équations selon y nécessite la modélisation des termes de viscosité et de conductivité turbulentes.

2.3.1 La fermeture du problème turbulent

Viscosité turbulente

Un modèle pour la viscosité turbulente particulièrement simple et adapté pour le proche voisinage d'une paroi est le modèle de longueur de mélange dû à Prandtl :

$$\mu_t = \rho l_m^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right| \quad (2.20)$$

où la longueur de mélange est donnée par $l_m = \kappa y$, avec la constante de von Kàrmàn κ de l'ordre de 0.41. Au proche voisinage de la paroi, les fluctuations de vitesse sont fortement amorties, de sorte que les effets de transport moléculaires deviennent prédominants sur les effets de transport turbulents. Afin de tenir compte de cela, on introduit une fonction d'amortissement pour l_m . La plus utilisée est celle de *Van Driest* [101] :

$$l_m = \kappa f y, \quad \text{avec} \quad f = 1 - \exp(-y^+/A) \quad (2.21)$$

où A est une épaisseur caractéristique de la zone d'influence visqueuse ($A = 26$). On obtient finalement, sous forme adimensionnelle :

$$\nu_t^+ = \frac{\mu_t^+}{\rho^+} = (\kappa f y^+)^2 \frac{du^+}{dy^+} \quad (2.22)$$

Conductivité turbulente

La modélisation de la conductivité turbulente se fait souvent par analogie avec la diffusion de la quantité de mouvement (analogie de Reynolds), en introduisant un nombre de Prandtl turbulent Pr_t , défini comme le rapport entre la viscosité et la conductivité tourbillonnaires :

$$Pr_t = \frac{\widetilde{u''v''} \frac{d\bar{T}}{dy}}{\widetilde{v''T''} \frac{d\bar{u}}{dy}} = \frac{\mu_t C_p}{\lambda_t} \quad (2.23)$$

Des mesures expérimentales sur plaque plane [57, 95] et dans un tube [40] montrent que pour l'air, Pr_t dépend de la distance à la paroi. Dans la zone extérieure de la couche limite Pr_t est une constante, sa valeur augmentant à mesure que l'on se rapproche de la paroi pour dépasser 1 en son voisinage immédiat ($y^+ < 10$). Des DNS d'écoulement dans un canal plan [53] confirment la constance de Pr_t loin de la paroi, mais elles ne montrent pas d'augmentation marquée lorsqu'on se rapproche de la paroi. Cette différence avec les mesures est probablement due au fait que les nombres de Reynolds des DNS sont très faibles [48], et indique que Pr_t est une fonction du Reynolds.

Kays [48] a résumé l'essentiel des travaux concernant le nombre de Prandtl turbulent dans des écoulements pariétaux de fluides ayant des nombres de Prandtl moléculaires allant de 0.7 (air) à 64 (huile). Il conclut que Pr_t est une fonction du nombre de Péclet turbulent Pe_t (avec Pe_t défini par $Pe_t = Pr_t \nu_t / \nu$). Pour des valeurs élevées de Pe_t , Pr_t est approximativement constant et égal à 0.85, alors qu'il augmente inversement avec Pe_t pour des Pe_t faibles. Cette dépendance peut être approximée par la relation :

$$Pr_t = \frac{0.7}{Pe_t} + 0.85 \quad (2.24)$$

Lorsque Pe_t tend vers zéro, l'écoulement n'est plus turbulent, donc Pr_t n'a plus de sens. Pour l'air, la limite entre les zones à Pr_t constant et Pr_t variable se situe autour de $y^+ = 30$. En pratique, on utilise souvent $Pr_t = 0.9$ dans les codes de calcul.

2.3.2 Lois de paroi dynamiques et thermiques

En modélisant la viscosité turbulente par un modèle de longueur de mélange et la conductivité turbulente à l'aide d'un nombre de Prandtl turbulent constant dans la sous-couche inertielle, les équations (2.18) et (2.19) s'intègrent facilement avec les conditions aux limites (2.14).

Dérivation

Afin d'obtenir des relations analytiques simples pour les profils adimensionnels de vitesse et de température dans la zone interne, on peut tirer parti de la structure de la zone interne décrite en 2.1.2.

Dans la **sous-couche visqueuse**, on a :

$$\mu_t^+ \ll \mu^+ \quad \text{et} \quad \mu_t^+ / Pr_t \ll \mu^+ / Pr$$

Les équations de la zone interne s'intègrent analytiquement dans cette zone pour donner les profils linéaires de vitesse et de température :

$$u^+ = y^+ \quad \text{et} \quad T^+ = Pr y^+ \quad (2.25)$$

Dans la **sous-couche inertielle**, on a, à l'opposé de la sous-couche visqueuse :

$$\mu_t^+ \gg \mu^+ \quad \text{et} \quad \mu_t^+ / Pr_t \gg \mu^+ / Pr$$

L'intégration des équations de la zone interne donne alors des profils logarithmiques de vitesse et de température :

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + C_{u,0} \quad \text{et} \quad T^+ = \frac{Pr_t}{\kappa} \ln(y^+) + C_{T,0} \quad (2.26)$$

Les constantes d'intégration $C_{u,0}$ et $C_{T,0}$ pour les profils logarithmiques sont *a priori* inconnues. Elles peuvent être déterminées de façon empirique par confrontation avec des mesures expérimentales dans la sous-couche inertielle. Ainsi, en compilant l'essentiel des expériences disponibles, *Kays & Crawford* [49] donnent :

$$C_{u,0} = 5.0 \quad \text{et} \quad C_{T,0} = 3.9 \quad (2.27)$$

La valeur de $C_{T,0}$ étant plus controversée, une expression due à *Launder & Spalding* [58] est souvent utilisée pour la déterminer :

$$C_{T,0} = Pr_t C_{u,0} + \frac{\pi/4}{\sin \pi/4} \left(\frac{A}{\kappa} \right) \left(\frac{Pr}{Pr_t} - 1 \right) \left(\frac{Pr_t}{Pr} \right)^{1/4} \quad (2.28)$$

Pour $Pr = 0.7$ (air) et $Pr_t = 0.85$, on obtient $C_{T,0} = 3.16$. Il est généralement admis que les flux de chaleur pariétaux déterminés avec cette relation dans un canal plan quasi isotherme sont sur-estimés [49].

Dans la **sous-couche tampon**, la dérivation de relations analytiques pour les profils de vitesse et de température est plus difficile, car les transports diffusifs moléculaires et turbulents sont du même ordre de grandeur. Cette zone n'est donc pas exploitée directement.

De l'“universalité” des lois de paroi

Les lois de paroi ne sont strictement valables que pour des écoulements pariétaux vérifiant les hypothèses décrites dans la section 2.1.3. Néanmoins, elles sont utilisées sans modification dans des modèles de paroi appliqués à toute sorte d'écoulements, en leur prêtant un caractère universel. Différentes études d'un écoulement turbulent sur plaque plane ou dans une conduite ont permis d'explicitement cette hypothèse :

- **gradient de pression longitudinal** : les études concernant cet effet se sont limitées à des couches limites non décollées. Dans le cas de la dynamique, un gradient de pression favorable (*i.e.* $dP/dx < 0$) a un effet stabilisateur sur la couche limite et entraîne un épaissement de la zone d'influence visqueuse. Un gradient de pression défavorable a un effet inverse. Dans les deux cas, la loi de paroi dynamique dans la sous-couche inertielle n'est pas affectée par des gradients de pression faibles à modérés. En ce qui concerne la thermique, l'influence du gradient de pression est qualitativement la même.
- **paroi courbée** : l'effet pour des courbures faibles est qualitativement le même que pour celui d'un gradient de pression longitudinal. Une paroi convexe a un effet stabilisateur sur les couches limites, contrairement à une paroi concave. On observe également une indépendance de la loi de paroi dynamique vis-à-vis de ce facteur, contrairement à la relation pour la thermique.

- **rugosité de la paroi** : une rugosité de surface engendre une augmentation du coefficient de frottement pariétal ainsi que du niveau de turbulence près de la paroi. Selon la valeur du nombre de Reynolds $Re_d = d u_\tau / \nu_w$ où d est une taille caractéristique de la rugosité, trois régimes peuvent être distingués :

1. $Re_d < 5$: effet négligeable ;
2. $5 < Re_d < 70$: l'épaisseur de la zone d'influence diminue à mesure que Re_d augmente ;
3. $Re_d > 70$: la zone d'influence visqueuse disparaît, et avec elle l'influence de la viscosité moléculaire. La sous-couche inertielle s'étend jusqu'à la paroi.

Les lois de paroi pour la dynamique et la thermique dans la sous-couche inertielle sont toujours logarithmiques, les constantes $C_{u,0}$ et $C_{T,0}$ dépendant de Re_d pour $Re_d > 5$ et s'écrivant :

$$C_{u,0} = \frac{1}{\kappa} \ln \left(\frac{32.6}{Re_d} \right) \quad \text{et} \quad C_{T,0} = \frac{1}{St_d} + \frac{Pr_t}{\kappa} \ln \left(\frac{32.6}{Re_d} \right) \quad (2.29)$$

où St_d est une corrélation expérimentale, fonction de Re_d et Pr [49].

- **turbulence extérieure** : celle-ci est généralement caractérisée par le rapport $Tu = u'/U_\infty$, où u' est la vitesse RMS dans l'écoulement en dehors de la couche limite. L'ordre de grandeur de Tu dans la zone interne est de 0.09 – 0.11. Tant que Tu à l'extérieur reste inférieur à ces limites, son influence est limitée à la zone externe et la zone interne n'est pas affectée. Pour des Tu plus importants, *i.e.* un écoulement extérieur très turbulent, on peut s'attendre à un effet non négligeable. Le manque de données expérimentales fait que les questions à ce sujet restent ouvertes [49].

2.4 Modèles de paroi et lois de paroi pour le cas anisotherme

Jusqu'à présent, les propriétés thermodynamiques du fluide ont été considérées constantes. Cette approximation s'avère fautive lorsque les gradients de température ne sont plus très faibles. La viscosité moléculaire d'un gaz peut varier très sensiblement quand la température varie beaucoup. Il en va de même avec la masse volumique, qui est inversement proportionnelle à la température, à pression statique fixée (loi d'état des gaz parfaits). Alors que les lois quasi isothermes sont performantes pour des écoulements dont les variations de température sont de quelques degrés, il ne peut en être de même avec des écarts de température significatifs.

Cette section présente plusieurs approches de l'anisothermicité mises en oeuvre dans divers cas : propulseur à propergol solide [69], rampe d'expansion adiabatique et rampe de compression isotherme [82], moteur à allumage commandé [4], propulseur à propergol liquide [24].

2.4.1 Formulation de Chieng & Launder modifiée

Une version évoluée de la loi logarithmique pour la vitesse a été proposée par *Chieng & Launder* [16] dans le cas où les propriétés thermodynamiques sont constantes, de manière à mieux reproduire les écoulements décollés. L'introduction dans cette loi des effets anisothermes a été proposée dans [69] et [74].

En conservant l'hypothèse d'une région pariétale formée d'une sous-couche visqueuse d'épaisseur y_v et d'une couche pleinement turbulente [16], les équations de la sous-couche visqueuse ($\mu(T) \gg \mu_t$) s'écrivent, pour un écoulement de gaz à faible vitesse :

$$\mu(\bar{T}) \frac{d\bar{u}}{dy} = \tau_W \quad (2.30)$$

$$-\frac{\mu(\bar{T}) C_p d\bar{T}}{Pr} = q_W \quad (2.31)$$

La loi de Sutherland est choisie comme loi de variation de la viscosité moléculaire dans la sous-couche visqueuse :

$$\mu(\bar{T}) = \mu_f \frac{\bar{T}^{1,5} T_f + S}{T_f^{1,5} \bar{T} + S} \quad \text{avec} \quad S = 110,4K \quad (2.32)$$

La formule (2.32) fait référence à une configuration de flamme (indice f relatif à la flamme). A Pr et C_p constants, l'équation (2.31) s'intègre en :

$$q_W y = -\frac{(T_f + S) \mu_f C_p}{Pr T_f^{1,5}} (IS(\bar{T}) - IS(T_w)) \quad (2.33)$$

avec

$$IS(T) = \frac{2}{3} T^{1,5} - 2S\sqrt{T} + 2S^{1,5} \operatorname{atan}\left(\frac{\sqrt{T}}{\sqrt{S}}\right) \quad (2.34)$$

En supposant $\mu(\bar{T})$ constant et égal à $\mu_m = \frac{\mu_w + \mu_v}{2}$, l'équation (2.30) s'intègre à son tour en :

$$\tau_w y = \mu_m \bar{u} \quad (2.35)$$

La détermination de la température T_v en y_v , qui permet d'évaluer la viscosité μ_v , sera précisée ultérieurement.

De même, les équations de la couche pleinement turbulente ($\mu(T) \ll \mu_t$) s'écrivent :

$$\mu_t \frac{d\bar{u}}{dy} = \tau_W \quad (2.36)$$

$$-\frac{\mu_t C_p d\bar{T}}{Pr_t} = q_W \quad (2.37)$$

Dans la couche pleinement turbulente, la viscosité turbulente est prédominante, et en supposant l'équilibre local des sources, elle peut s'écrire $\mu_t = \rho \sqrt{k} \kappa^* y$ avec $\kappa^* = C_\mu^{1/4} \kappa$ et

C_μ constante du modèle $k - \varepsilon$ égale à 0.09. Si de plus ρk est supposé peu varier dans cette zone, μ_t s'écrit alors sous la forme :

$$\mu_t = \rho_w \sqrt{\frac{\rho}{\rho_w}} \sqrt{\frac{\rho_v k_v}{\rho_w}} \kappa^* y \quad (2.38)$$

Chieng & Launder supposent que la limite de la sous-couche visqueuse se caractérise par un nombre de Reynolds y_v^* , basé sur l'énergie cinétique turbulente locale, constant :

$$y_v^* = \frac{y_v \sqrt{\frac{\rho_v k_v}{\rho_w}}}{\nu_v} = 20,5 \quad (2.39)$$

On utilise l'équation d'évolution suivante pour ρk :

$$\rho_v k_v = \frac{\rho_1 k_1 - \rho_2 k_2}{y_1 - y_2} (y_v - y_1) + (\rho k)_{lim} \quad (2.40)$$

$$\text{avec} \quad (\rho k)_{lim} = -y_1 \frac{\rho_1 k_1 - \rho_2 k_2}{y_1 - y_2} + \rho_1 k_1 \quad (2.41)$$

On peut alors déterminer les valeurs de $\rho_v k_v$ et y_v par résolution du système formé des équations (2.39) et (2.40).

Après ré-écriture, l'équation (2.37) peut s'intégrer en :

$$2\rho_w C_p \sqrt{T_w} \sqrt{\frac{\rho_v k_v}{\rho_w}} (\sqrt{T_v} - \sqrt{\bar{T}}) = \frac{Pr_t q_w}{\kappa^*} \ln\left(\frac{y}{y_v}\right) \quad (2.42)$$

$$\text{sachant que} \quad \frac{\rho}{\rho_w} = \frac{T_w}{T} \quad (2.43)$$

En écrivant la relation (2.42) pour $y = y_1$ et $\bar{T} = T_1$, et la relation (2.33) pour $y = y_v$ et $\bar{T} = T_v$, on obtient une équation du type $f(T_v) = 0$ qui peut être résolue par la méthode de Newton.

Détermination de la valeur de u_v :

La loi de Crocco peut s'appliquer dans la couche pleinement turbulente car, d'une part le nombre de Prandtl turbulent est pris constant et voisin de l'unité, d'autre part le gradient longitudinal de pression est supposé nul. L'écoulement étant supposé subsonique, cette loi peut s'écrire :

$$T = \frac{T_1 - T_v}{u_1 - u_v} u + T_v - \frac{T_1 - T_v}{u_1 - u_v} u_v \quad (2.44)$$

L'équation (2.36) peut donc être intégrée. L'équation alors obtenue écrite pour $y = y_1$ et $T = T_1$ permet, avec la relation (2.35) écrite pour $y = y_v$, de déterminer la valeur de u_v .

Les épaisseurs des sous-couches visqueuse et thermique ont été supposées égales, en considérant deux aspects : le nombre de Prandtl est de l'ordre de l'unité, et surtout, y_v

ne représente pas l'épaisseur réelle de la zone en laquelle $\mu_t \ll \mu$, mais une distance de raccordement permettant d'omettre la zone tampon entre la sous-couche visqueuse réelle et la zone logarithmique.

A chaque itération, les valeurs connues de y_1 , ρ_w , $\rho_1 k_1$ et $\rho_2 k_2$ permettent d'évaluer $\rho_v k_v$ et y_v grâce aux équations (2.39) et (2.40). Ensuite, connaissant T_1 on obtient T_v , et avec u_1 on obtient u_v . Les valeurs de raccordement T_v et u_v étant connues, on détermine les flux pariétaux τ_w et q_w , puis $\rho_1 k_1$ pour l'itération suivante.

Dans le développement des lois précédentes, C_p et Pr ont été considérés constants, contrairement à μ et λ . Cette approche a été validée dans [69] : les variations de μ et λ sont similaires et très supérieures à celles de C_p et Pr .

2.4.2 Approche macroscopique

Une autre technique, utilisée dans [82] et [31] par exemple, consiste à utiliser des modèles macroscopiques pour en construire de nouveaux.

En premier lieu, dans le cadre d'une approche RANS bas-Reynolds, différents modèles sont testés afin de trouver le plus adéquat. Suite à ces essais, le modèle $k - \varepsilon$ bi-couche [63] a été retenu dans [82] et [31]. Puis, par réduction de modèle (hypothèses de couche limite et variations 1D normales à la paroi), des lois de paroi sont fabriquées.

Remarque : Dans cette sous-section, il est supposé que la paroi est une plaque plane.

Écoulement sur une paroi adiabatique :

L'équation de conservation de la quantité de mouvement dans la zone de proche paroi se réduit à :

$$\frac{\partial}{\partial y} \left((\mu + \mu_t) \frac{\partial u}{\partial y} \right) = 0 \quad (2.45)$$

La viscosité dynamique turbulente μ_t est modélisée par la relation :

$$\mu_t = \kappa \sqrt{\rho \rho_w} y u_\tau (1 - e^{-y^+/70}) \text{ avec } y^+ = \frac{\rho_w u_\tau y}{\mu_w}. \quad (2.46)$$

Afin d'avoir une relation pour la vitesse u valable aussi bien dans les régions à haut et bas Reynolds, la vitesse de frottement u_τ est définie comme solution de l'équation

$$u = u_\tau \sqrt{\frac{\rho_w}{\rho}} f(y^+) \quad (2.47)$$

où la fonction f est telle que l'expression de u fournie par la relation (2.47) est solution de l'équation (2.45) avec μ_t défini par la relation (2.46).

La loi de paroi (2.47) n'est pas connue de façon explicite et dépend de la distribution de la densité. Pour contourner cette difficulté, on considère, dans un premier temps, un

écoulement à basse vitesse, de manière à pouvoir négliger les variations de densité. Dans ce cas, la fonction non linéaire de Reichardt f_r définie par

$$f_r(y^+) = 2.5 \log(1 + \kappa y^+) + 7.8 \left(1 - e^{-y^+/11} - \frac{y^+}{11} e^{-0.33y^+} \right) \quad (2.48)$$

avec $y^+ = (\rho_w u_\tau y) / \mu_w$, constitue un bon choix pour la fonction f .

La fonction de Reichardt permet de raccorder le profil de vitesse de la zone linéaire à celui de la zone logarithmique.

Dans un second temps, la loi de paroi ainsi obtenue pour la vitesse est adaptée à un écoulement compressible (toujours sur paroi adiabatique). Dans ce cas, il est nécessaire :

1. d'une part, de prescrire μ_w et ρ_w pour fermer le modèle de viscosité dynamique turbulente (2.46) ;
2. d'autre part, de tenir compte des variations de densité dans la relation (2.47) et de modifier l'expression (2.48) de la fonction de Reichardt car celle-ci n'est valide qu'à Mach faible.

Dans le cas d'une paroi adiabatique, on définit le facteur thermique pariétal r par [21] :

$$r = \frac{T_f - T_e}{T_{ie} - T_e} \quad (2.49)$$

où T_f désigne la température de frottement, T_e la température sur le bord extérieur de la couche limite, et où la température d'arrêt T_{ie} est donnée par :

$$T_{ie} = T_e \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} Ma_e^2 \right) \quad (2.50)$$

avec γ le coefficient isentropique.

Pour un écoulement turbulent, on admet que $r = Pr^{1/3}$ [21]. Par conséquent, la température de frottement T_f s'exprime par :

$$T_f = T_e \left(1 + Pr^{1/3} \frac{\gamma - 1}{2} Ma_e^2 \right) \quad (2.51)$$

La paroi étant adiabatique, sa température est égale à la température de frottement T_f .

La viscosité au mur μ_w est fournie par la loi de Sutherland :

$$\mu_w = \mu_e \left(\frac{T_w}{T_e} \right)^{1/2} \frac{1 + 110.4/T_e}{1 + 110.4/T_w} \quad (2.52)$$

La densité au mur ρ_w s'obtient grâce à la loi de Crocco, qui s'écrit [21] :

$$T = T_w + (T_{ie} - T_w) \frac{u}{u_e} - (T_{ie} - T_e) \left(\frac{u}{u_e} \right)^2 \quad (2.53)$$

La pression thermodynamique est supposée constante à travers la couche limite ($\rho_w/\rho \approx T/T_w$), on aboutit à :

$$\rho_w = \rho \left[1 + \left[\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_e^2 \right) \frac{T_e}{T_w} - 1 \right] \frac{u}{u_e} - \frac{\gamma-1}{2} Ma_e^2 \frac{T_e}{T_w} \left(\frac{u}{u_e} \right)^2 \right] \quad (2.54)$$

Avec un maillage non structuré, l'implémentation des relations (2.52) et (2.54) est délicate, car il est alors difficile de déterminer (u_e, T_e, Ma_e) . Par conséquent, on choisit de travailler uniquement avec des quantités appartenant à l'écoulement infini amont (indice ∞) ou à une paroi fictive (indice δ). Ma_e est ainsi remplacé par Ma_δ , le nombre de Mach local à la paroi fictive. Plus précisément, connaissant $(\rho_\delta, T_\delta, Ma_\delta, u_\infty, T_w)$, la densité à la paroi réelle ρ_w est donnée par la formule :

$$\rho_w = \rho_\delta \left[1 + \left[\left(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_\delta^2 \right) \frac{T_\delta}{T_w} - 1 \right] \frac{u_\delta}{u_\infty} - \frac{\gamma-1}{2} Ma_\delta^2 \frac{T_\delta}{T_w} \left(\frac{u_\delta}{u_\infty} \right)^2 \right] \quad (2.55)$$

Afin de tenir compte du caractère compressible de l'écoulement, la loi de Reichardt est corrigée à l'aide d'un terme multiplicatif. En compressible, la loi de paroi pour la vitesse s'écrit alors [82] :

– pour $y^+ > 100$:

$$u \left[\frac{1}{a} \left(\arcsin \frac{2a^2 u / u_\infty - b}{\sqrt{b^2 + 4a^2}} + \arcsin \frac{b}{\sqrt{b^2 + 4a^2}} \right) \right]^{-1/4} = u_\tau f_r(y^+) \quad (2.56)$$

avec $a^2 = \frac{\gamma-1}{2} Ma_\delta^2 \frac{T_\delta}{T_w}$, $b = \left(1 + \frac{\gamma-1}{2} Ma_\delta^2 \right) \frac{T_\delta}{T_w} - 1$ et f_r défini par la formule (2.48) ;

– pour $y^+ < 5$:

$$u = u_\tau y^+ \quad (2.57)$$

– pour $5 < y^+ < 100$: on utilise une interpolation linéaire entre les expressions (2.56) et (2.57).

Écoulement sur une paroi isotherme :

Avec une paroi isotherme, il est nécessaire de déterminer une loi pour la température. De façon faible, cela revient à trouver une loi pour le flux de chaleur $\chi \frac{\partial T}{\partial y}$, avec $\chi = (\gamma\mu)/Pr$. Le point de départ est l'équation de conservation de l'énergie dans la couche limite

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(u(\mu + \mu_t) \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((\chi + \chi_t) \frac{\partial T}{\partial y} \right) = 0 \quad (2.58)$$

intégrée entre la paroi fictive ($y = \delta$) et la paroi réelle ($y = 0$), *i.e.* :

$$(\chi + \chi_t) \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta} + u(\mu + \mu_t) \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{\delta} = \chi \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_0 \quad (2.59)$$

car $\frac{\partial T}{\partial y} \Big|_0 \neq 0$ et $u|_0 = 0$.

Dans [82], deux approches sont successivement adoptées, puis comparées, afin de calculer le terme $\frac{\partial T}{\partial y} \Big|_0$:

1. l'utilisation de la relation de Reynolds [21]

$$C_h = \frac{s C_f}{2} = \frac{1.24}{2} C_f = 0.62 C_f \quad (2.60)$$

entre le coefficient de frottement C_f et le coefficient de transfert de chaleur pariétal C_h , conduit à

$$(\chi + \chi_t) \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta} + u \rho_w u_{\tau}^2 = \chi \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_0 = -1.24 \rho_w u_{\tau}^2 \frac{T_w - T_f}{u} \quad (2.61)$$

La loi de Crocco fournit le densité au mur ρ_w .

2. Le gradient $\frac{\partial T}{\partial y}$ est directement calculé avec la loi de Crocco, et on obtient :

$$\chi \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_0 = \frac{\chi}{\mu} \left(T_{\delta} + \frac{\gamma - 1}{2} Ma_{\delta}^2 T_{\delta} - T_w \right) \frac{\rho_w u_{\tau}^2}{u_{\infty}} \quad (2.62)$$

Remarque : Au lieu de calculer $\chi \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_0$, on peut calculer le terme $\chi \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{\delta}$, toujours avec la loi de Crocco. Cependant, la pratique a montré [82] que la relation (2.62) donne de meilleurs résultats.

Zones de recirculation :

Dans les zones de recirculation, les vitesses u_{τ} et u sont petites. Afin de ne pas sous-estimer le flux de chaleur dans ces zones-là, il est proposé dans [82] de remplacer la relation pour le flux de frottement $\rho_w u_{\tau}^2 = (\mu + \mu_t) \frac{\partial u}{\partial y}$ utilisée dans les équations (2.61) et (2.62) par :

$$(\mu + \mu_t) \frac{\partial u}{\partial y} = C_{\mu}^{-3/4} (\mu + \mu_t) \frac{\partial \sqrt{k}}{\partial y} \quad (2.63)$$

ce qui revient à changer l'échelle de vitesse locale et à prendre pour celle-ci $u = C_{\mu}^{-3/4} \sqrt{k}$. C_{μ} est une constante égale à 0.09 qui intervient dans le modèle $k - \varepsilon$ haut-Reynolds

$$\mu_t = C_{\mu} \rho \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.64)$$

permettant de calculer la viscosité dynamique turbulente μ_t .

Ces travaux ont été étendus au cas des gaz réels dans [31].

Dans les sous-sections 2.4.1 et 2.4.2, on a cherché à intégrer explicitement la sous-couche visqueuse et la zone tampon. Cette approche est également utilisée dans [10]. Dans les deux sous-sections suivantes, une autre technique est adoptée : elle consiste à extrapoler les quantités à la paroi à partir des données issues de la zone logarithmique, sans s'occuper de la sous-couche visqueuse.

2.4.3 Le modèle de paroi LnKC [4]

Cette méthode reprend le développement de la loi logarithmique classique basée sur la vitesse de frottement. Elle consiste à définir des variables adimensionnelles qui permettent de s'affranchir de la prise en compte des variations des propriétés thermodynamiques.

Démarche et développement

En définissant $\nu_t^{++} = \nu_t/\nu$, au lieu de $\nu_t^+ = \nu_t/\nu_w$, les équations (2.12) et (2.13) peuvent s'écrire sous la forme :

$$(1 + \nu_t^{++}) \frac{du^+}{dy^+} = \frac{1}{\rho^+} \frac{\nu_w}{\nu} \quad (2.65)$$

$$\left(\frac{1}{Pr} + \frac{\nu_t^{++}}{Pr_t} \right) \frac{dT^+}{dy^+} = \frac{1}{\rho^+} \frac{\nu_w}{\nu} \quad (2.66)$$

Dans ν_t^{++} , c'est la viscosité locale ν et non sa valeur à la paroi qui est utilisée. Au regard de ces équations, de nouvelles unités pariétales anisothermes d'espace η^+ , de vitesse ψ^+ et de température θ^+ sont définies à l'aide des différentielles :

$$d\eta^+ = \frac{\nu_w}{\nu} dy^+, \quad d\psi^+ = \rho^+ du^+, \quad d\theta^+ = \rho^+ dT^+ \quad (2.67)$$

Les équations (2.65) et (2.66) deviennent :

$$(1 + \nu_t^{++}) \frac{d\psi^+}{d\eta^+} = 1 \quad (2.68)$$

$$\left(\frac{1}{Pr} + \frac{\nu_t^{++}}{Pr_t} \right) \frac{d\theta^+}{d\eta^+} = 1 \quad (2.69)$$

avec pour conditions aux limites :

$$\begin{aligned} \psi^+ \Big|_{\eta^+=0} &= 0, & d\psi^+/d\eta^+ \Big|_{\eta^+=0} &= 1 \\ \theta^+ \Big|_{\eta^+=0} &= 0, & d\theta^+/d\eta^+ \Big|_{\eta^+=0} &= Pr \end{aligned} \quad (2.70)$$

Dans ces équations, le paramètre d'isothermicité n'intervient plus de façon explicite.

Pour $\eta^+ \rightarrow 0$, on peut supposer que le transport turbulent est négligeable par rapport au transport moléculaire. On obtient alors les profils linéaires $\psi^+ = \eta^+$ et $\theta^+ = Pr \eta^+$ dans les sous-couches visqueuses. Par analogie avec le cas quasi isotherme, les profils $\psi^+(\eta^+)$ et $\theta^+(\eta^+)$ sont supposés logarithmiques dans les sous-couches inertielles, comme le sont les profils $u^+(y^+)$ et $T^+(y^+)$ dans le cas quasi isotherme.

En supposant que l'augmentation de l'épaisseur de la sous-couche visqueuse pour $B_q < 0$ peut être décrite par le changement de variable $y^+ \rightarrow \eta^+$, les lois de paroi s'écrivent :

$$\text{dynamique : } \begin{cases} \eta^+ \leq 10.8 & : \psi^+ = \eta^+ \\ \eta^+ > 10.8 & : \psi^+ = 2.44 \ln(\eta^+) + 5.0 \end{cases} \quad (2.71)$$

$$\text{thermique : } \begin{cases} \eta^+ \leq 13.2 & : \theta^+ = Pr \eta^+ \\ \eta^+ > 13.2 & : \theta^+ = 2.075 \ln(\eta^+) + 3.9 \end{cases} \quad (2.72)$$

Formulation du modèle

Distance adimensionnelle – La détermination de la distance adimensionnelle du premier point de calcul à la paroi nécessite l'intégration de la relation (2.67) définissant la différentielle de η^+ :

$$\eta_1^+ = \int_0^{y_1^+} \frac{\nu_w}{\nu} dy^+ \quad (2.73)$$

On choisit d'approcher cette relation par l'expression :

$$\eta_1^+ = \frac{\nu_w}{\nu_1} y_1^+ \quad (2.74)$$

où ν_1 représente une valeur moyenne de ν entre $y^+ = 0$ et $y^+ = y_1^+$.

En supposant que la relation :

$$u_\tau = C_\mu^{1/4} k^{1/2} \quad (2.75)$$

pour un point de la sous-couche visqueuse est valable dans le cas anisotherme, on obtient finalement :

$$\eta_1^+ = \frac{y_1 C_\mu^{1/4} k_1^{1/2}}{\nu_1} \quad (2.76)$$

Flux de chaleur pariétal – En décrivant la dépendance de la densité à la température à l'aide de l'équation (2.15), l'intégration de la différentielle de θ^+ de l'équation (2.67) mène à :

$$\int_{\eta^+=0}^{\eta^+} d\theta^+ = \int_{T^+=0}^{T^+} \frac{1}{1 - B_q T^+} dT^+ \quad (2.77)$$

puis à :

$$\theta^+ = -\frac{1}{B_q} \ln(1 - B_q T^+) \quad (2.78)$$

En utilisant à nouveau l'équation (2.15) et en tirant parti du fait que la pression peut être considérée comme constante à travers la couche limite ($\rho/\rho_w = T_w/T$), on trouve finalement :

$$\theta^+ = -\frac{1}{B_q} \ln(T/T_w) \quad (2.79)$$

ce qui mène à l'expression suivante pour le flux de chaleur :

$$q_w = \frac{\rho_w C_p C_\mu^{1/4} k_1^{1/2} T_w \ln(\tilde{T}_1/T_w)}{\theta_1^+} \quad (2.80)$$

où on a utilisé (2.75).

Cette relation fait intervenir le logarithme du rapport de température entre gaz et paroi, et non la différence de température. θ_1^+ est obtenue grâce à la loi de paroi (2.72).

Frottement pariétal – On choisit d'exprimer le frottement pariétal à l'aide d'une expression hors-équilibre :

$$\tau_w = \rho_w C_\mu^{1/4} k_1^{1/2} u_\tau \quad (2.81)$$

où la vitesse de frottement est exprimée comme une moyenne géométrique entre la relation (2.75) et une expression $u_\tau(u_1, \psi_1^+)$ la liant à la vitesse dimensionnelle et adimensionnelle au premier point de calcul. La détermination exacte de la relation $u_\tau(u_1, \psi_1^+)$ nécessite l'intégration du différentiel de ψ^+ de l'équation (2.67) :

$$\psi^+ = \int_0^{u_1^+} \frac{\rho}{\rho_w} du^+ \quad (2.82)$$

Ne connaissant pas la dépendance entre densité et vitesse dans la couche interne, on choisit d'utiliser l'approximation grossière :

$$\psi_1^+ = \frac{\rho_1}{\rho_w} u_1^+ \quad (2.83)$$

pour obtenir :

$$u_\tau = \frac{\rho_1 u_1}{\rho_w \psi_1^+} \quad (2.84)$$

L'expression pour le frottement pariétal (2.81) devient donc :

$$\tau_w = \rho_1 C_\mu^{1/4} k_1^{1/2} \frac{u_1}{\psi_1^+} \quad (2.85)$$

Or, selon cette équation, la diminution de la densité qu'engendre une flamme prémélangée entraîne *a priori* une diminution du frottement pariétal, et donc de la production d'énergie cinétique turbulente. Or, la seule étude numérique à ce sujet [105] indique une production de k au voisinage de la paroi durant l'interaction flamme-paroi. Pour rendre compte qualitativement de cet effet, on choisit d'écrire le frottement pariétal comme :

$$\tau_w = \rho_w C_\mu^{1/4} k_1^{1/2} \frac{u_1}{\psi_1^+} \quad (2.86)$$

qui fait intervenir la densité ρ_w à la température de la paroi plutôt que ρ_1 . La densité ρ_w n'étant pas influencée par la flamme (pour des parois métalliques, on peut considérer que T_w reste constante durant l'interaction), on évite ainsi la diminution de la production de k par frottement aux parois que prédirait la relation (2.85). ψ_1^+ est obtenu grâce à la loi (2.71).

2.4.4 Les lois de paroi LMF et LTM [24]

La loi de paroi LMF ("Loi à nombre de Mach Faible") développée pour Snecma Moteurs (site de Vernon) dans la thèse de F. Dabireau [24] s'appuie sur les DNS [71] et [73] d'écoulements turbulents fortement anisothermes, à faible nombre de Mach, en canal plan tridimensionnel périodique. Cette loi de paroi permet de prendre en compte les variations de la masse volumique dues à de forts gradients de température, le nombre de Mach restant faible. Elle est écrite sous l'hypothèse de mélange parfaitement homogène et de C_p constant. Les étapes *i*), *ii*) et *iii*) rappellent comment la loi de paroi LMF a été dérivée.

i) Moyenner spatialement dans les directions homogènes de l'écoulement (directions x et z) et temporellement l'équation de conservation de la quantité de mouvement conduit à la relation :

$$-\bar{\rho} \widetilde{u''v''} + \bar{\mu} \frac{d\bar{u}}{dy} = \tau_w . \quad (2.87)$$

Pour intégrer l'équation (2.87), il est nécessaire de modéliser le flux turbulent de quantité de mouvement $-\bar{\rho} \widetilde{u''v''}$. On utilise l'hypothèse de Boussinesq :

$$-\bar{\rho} \widetilde{u''v''} = \mu_t \frac{d\bar{u}}{dy}. \quad (2.88)$$

La viscosité turbulente μ_t permet de prendre en compte la turbulence. μ_t est modélisée par l'hypothèse de longueur de mélange de Prandtl :

$$\mu_t = \bar{\rho} l_m^2 \left| \frac{d\bar{u}}{dy} \right| \quad (2.89)$$

où la longueur de mélange est donnée par $l_m = \kappa y$.

La zone logarithmique est suffisamment proche de la paroi pour que puissent s'appliquer les hypothèses de couche limite (zone où le frottement est constant), mais suffisamment turbulente pour que le transport diffusif moléculaire soit négligeable devant le transport turbulent. Par conséquent, l'équation (2.87) devient

$$-\bar{\rho} \widetilde{u''v''} = \tau_w \quad (2.90)$$

et on aboutit ainsi à la relation

$$\tau_w = \bar{\rho} (\kappa y)^2 \left(\frac{d\bar{u}}{dy} \right)^2. \quad (2.91)$$

En utilisant les variables adimensionnelles, l'équation (2.91) devient :

$$\left(\frac{\bar{\rho}}{\rho_w}\right)^{1/2} du^+ = \frac{1}{\kappa} \frac{dy^+}{y^+}. \quad (2.92)$$

L'intégration de l'équation (2.92) indique que la transformation de Van Driest [100] suit une loi logarithmique :

$$u_{VD}^+ = \int_0^{u^+} \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho_w}\right)^{1/2} du^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (2.93)$$

où C est une constante.

ii) En appliquant à l'équation de conservation de l'énergie totale le même traitement qu'à l'équation de conservation de la quantité de mouvement, on trouve (zone où le flux de chaleur total est constant) :

$$-\lambda_t \frac{d\bar{T}}{dy} = q_w. \quad (2.94)$$

La conductivité turbulente λ_t est modélisée par analogie avec la conductivité moléculaire (analogie de Reynolds) en introduisant un nombre de Prandtl turbulent Pr_t défini par la formule $Pr_t = \mu_t C_p / \lambda_t$.

En utilisant un modèle de longueur de mélange pour la viscosité turbulente, l'équation (2.94) devient :

$$q_w = -\frac{C_p}{Pr_t} \bar{\rho} (\kappa y)^2 \frac{d\bar{u}}{dy} \frac{d\bar{T}}{dy}. \quad (2.95)$$

Rappelons que le paramètre d'isothermicité B_q est défini par :

$$B_q = \frac{q_w}{\rho_w C_p u_\tau T_w} = \frac{T_\tau}{T_w} \quad (2.96)$$

En adimensionnant le rapport de l'équation (2.95) à l'équation (2.91), puis en l'intégrant, on trouve

$$\frac{\bar{T}}{T_w} = C_1 - Pr_t B_q u^+ \quad (2.97)$$

en supposant que le nombre de Prandtl turbulent est constant.

D'après [8] il est raisonnable de prendre la constante C_1 égale à 1.

iii) Étant convenu que la pression thermodynamique est constante à travers la couche limite, on a $\rho_w / \bar{\rho} \simeq \bar{T} / T_w$. Par conséquent, en combinant les équations (2.93) et (2.97), on aboutit à la loi de paroi couplée vitesse-température ci-dessous (loi LMF) :

$$\begin{cases} \frac{2}{Pr_t B_q} \left[1 - \sqrt{1 - Pr_t B_q u^+} \right] = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \\ T^+ = Pr_t u^+ \end{cases} \quad (2.98)$$

La loi de paroi LTM (“Loi adaptée à Tout nombre de Mach”) développée pour Snecma Moteurs (site de Vernon) dans la thèse de F. Dabireau [24] permet quant à elle de prendre en compte les variations de la masse volumique dans le cas d’un écoulement compressible à nombre de Mach supérieur à l’unité.

La démarche conduisant à la loi de paroi LTM est similaire⁴ à celle mise en œuvre pour la loi LMF, sauf que le terme $\partial(\tau_{ij}U_i)/\partial x_j$ de dissipation par effet Joule n’est pas négligé. Les données de référence utilisées lors de la dérivation de cette loi de paroi sont issues des DNS de canaux supersoniques à Mach 1.5 et Mach 3 de *Coleman & al.* [18].

La loi de paroi LTM est une loi de paroi couplée vitesse-température qui s’écrit [24] :

$$\begin{cases} \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C = \frac{\sqrt{B}}{u_\tau} \left[\arcsin \left(\frac{A + u_\tau u^+}{\sqrt{A^2 + B}} \right) - \arcsin \left(\frac{A}{\sqrt{A^2 + B}} \right) \right] \\ T^+ = 1 - Pr_t B_q u^+ - \frac{Pr_t(\gamma - 1) Ma_\tau^2}{2} u^{+2} \end{cases} \quad (2.99)$$

avec :

$$A = \frac{q_w}{\tau_w} \quad (2.100)$$

et

$$B = \frac{2C_p T_w}{Pr_t} \quad (2.101)$$

Le nombre de Mach de frottement Ma_τ est défini par $Ma_\tau = u_\tau/c_w$, avec c_w vitesse du son à la paroi.

2.4.5 Conclusion

Différents modèles et lois de paroi pour les écoulements turbulents anisothermes ont été présentés. Cependant, aucun n’est adapté au cas d’un écoulement turbulent multi-espèce réactif. Dans cette étude, des lois de paroi tenant compte de l’hétérogénéité du mélange gazeux vont être développées (*cf* partie II).

⁴La transformée de Van Driest est valide pour des nombres de Mach élevés [41].

Chapitre 3

La Simulation Numérique Directe

Ces vingt dernières années ont vu la complexité des écoulements simulés par DNS considérablement augmenter, évoluant d'écoulements incompressibles à des écoulements compressibles et réactifs, tandis que le nombre de Reynolds de ces simulations directes, limité par la puissance des ordinateurs, est toujours resté faible. La DNS a aussi rendu possible l'exploration de la physique de la turbulence grâce à la simulation d'écoulements idéaux qui ne peuvent être reproduits facilement en laboratoire. D'autre part, l'évolution croissante de la complexité géométrique des configurations calculées a stimulé le développement de nouveaux algorithmes numériques et celui des moyens informatiques disponibles (augmentation exponentielle de la puissance des micro-processeurs et essor du calcul parallèle).

3.1 Bref historique de la Simulation Numérique Directe

La Simulation Numérique Directe est née au début des années soixante-dix au *National Center for Atmospheric Research*, mais ce sont les travaux pionniers de Rogallo [86] examinant les effets d'un cisaillement moyen, d'une contrainte irrotationnelle et d'une rotation sur la turbulence homogène, qui jettent les bases des futures DNS de turbulence homogène. A cette époque, les performances des ordinateurs ne permettent pas de réaliser des DNS d'écoulements turbulents confinés, et ce n'est qu'en 1987 que Moin *et al.* [54] effectuent la première DNS d'écoulement turbulent pleinement développé en canal plan¹. L'écoulement en canal se révèle être une pierre angulaire de l'étude de la turbulence en situation confinée et des études ultérieures modifient la configuration du canal plan afin d'analyser la réponse de ce type de turbulence à des facteurs tels que la rotation, le caractère tridimensionnel, la transpiration [99], la courbure transverse, le transfert de chaleur [47] et la présence de riblets sur l'un des deux murs [17]. Toutes ces DNS sont homogènes dans la direction de

¹Il est à noter que cette DNS a été précédée, la même année, par une DNS de ce même écoulement dans un canal aux parois curvilignes [67].

l'écoulement et des conditions périodiques sont donc imposées dans cette direction. Au milieu des années quatre-vingt-dix, des progrès dans la prescription de la turbulence en entrée permettent de s'attaquer à des écoulements plus complexes, tels l'écoulement au-dessus d'une marche descendante ou la séparation de la couche limite s'établissant sur une plaque plane. La simulation numérique directe d'écoulements turbulents compressibles a été initiée au début des années quatre-vingt, mais ce n'est que dix ans plus tard que des études sérieuses sont entreprises avec des DNS de turbulence homogène compressible, puis suivent une DNS de canal compressible [18] et de couche limite turbulente compressible.

3.2 Considérations numériques

La simulation numérique directe de la turbulence requiert une méthode numérique capable de reproduire avec précision une large gamme d'échelles spatiales et temporelles, ce qui soulève de nombreuses difficultés d'ordre numérique.

3.2.1 Deux types de DNS

Un premier type de configuration correspond à des simulations dites *spatiales*. La figure 3.1 en présente un exemple : il s'agit d'un écoulement s'établissant au-dessus d'une plaque plane imperméable (configuration ayant notamment été analysée par *Rai & Moin* [83]). Dans ce type de simulations, les frontières E et S (*cf* figure 3.1) sont traitées respectivement comme des entrées et des sorties de fluide. Les DNS de type *spatiales* sont bien adaptées aux cas où la physique du phénomène étudié empêche de supposer une homogénéité spatiale. Dans l'exemple de la figure 3.1, la non-conservation du débit massique entre E et S ne pose pas de problème particulier car ces deux frontières sont traitées séparément. En contrepartie, le domaine simulé doit être caractérisé par une longueur assez grande dans le sens de l'écoulement principal, de manière à pouvoir considérer que la turbulence dans la partie aval est relativement indépendante de celle injectée au niveau de la frontière E. En pratique, cette contrainte conduit le plus souvent à l'utilisation de maillages de dimension trop importante au vue de la capacité des ordinateurs actuels [83]. Par ailleurs, même pour une longueur simulée suffisamment grande, une attention toute particulière doit être portée à la prescription des conditions limites amont (*cf* sous-section 3.2.4).

Dans les simulations dites *temporelles*, les frontières E et S sont traitées par des conditions de type périodique. Une structure traversant la frontière S rentre en même temps dans le domaine par la frontière E. On évite ainsi la perte d'information caractérisant les configurations spatiales. Il s'en suit que la turbulence peut se développer au fur et à mesure que le calcul progresse dans le temps. Cette approche, illustrée à la figure 3.2, est utilisée depuis longtemps pour étudier les écoulements de type canal [54], couche limite temporelle [96] ou conduite. Les gradients longitudinaux aux points de la frontière S sont calculés en utilisant les points de S et de son voisinage, ainsi que les points du voisinage de E. Ceci permet d'employer la même discrétisation sur les frontières que dans le centre du domaine. Les conditions limites périodiques peuvent donc être considérées comme une absence de

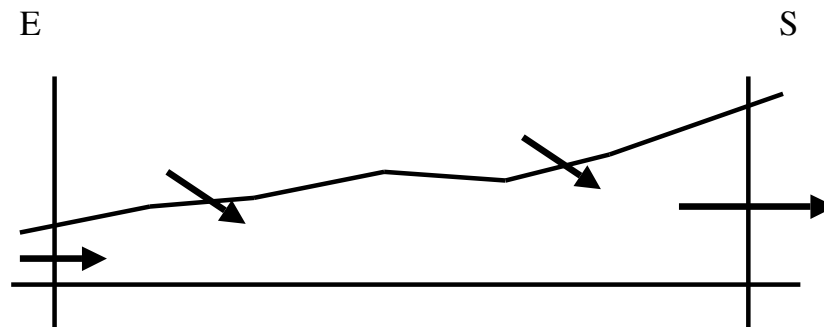


Fig. 3.1: Configuration d'une DNS spatiale - Couche limite sur plaque plane

conditions limites puisque les points de S et de E voient la même physique que les points intérieurs. Il est important de noter que l'approche temporelle nécessite l'égalité des débits massiques traversant les frontières E et S à chaque instant. Par contre, le temps de calcul est souvent beaucoup moins long que pour une DNS spatiale, car le domaine simulé peut être plus réduit. Toutefois, la taille du domaine se doit d'être au moins deux fois supérieure à la longueur intégrale de la turbulence afin d'assurer le bon développement des échelles énergétiques. Les DNS temporelles présentent aussi l'avantage non négligeable de diminuer le nombre de frontières en lesquelles des conditions limites doivent être prescrites.

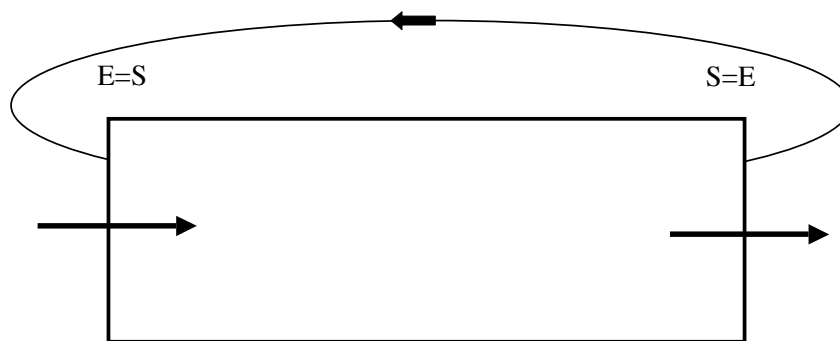


Fig. 3.2: Configuration d'une DNS temporelle - Ecoulement de conduite

3.2.2 Méthodes numériques privilégiées en DNS

Schéma en espace

La gamme d'échelles devant être représentées avec précision lors de la simulation numérique directe est dictée par la physique. Le maillage détermine les échelles qui sont représen-

tées, tandis que la précision avec laquelle ces échelles sont reproduites est fixée par la méthode numérique.

Dans de nombreuses situations, la turbulence apparaît comme l'étape ultime de l'amplification et de la saturation de plusieurs modes instables d'un écoulement donné. Il est donc essentiel que la méthode numérique soit capable de laisser se développer les modes naturellement instables dans le domaine de calcul. Par ailleurs, afin de réduire le temps de calcul, on cherche à minimiser le nombre de points utilisés pour discrétiser les plus petites structures tourbillonnaires. La méthode numérique choisie ne doit donc pas perturber par dispersion, mais surtout dissipation, les échelles dissipatives. En effet, l'augmentation artificielle du taux de dissipation de ces petites structures diminue le nombre de Reynolds effectif de la simulation (*cf* équation (1.36)). Par conséquent, la DNS requiert une méthode numérique la moins dissipative possible sur l'ensemble des nombres d'onde supportés par le maillage.

La simulation numérique de la turbulence par Orszag [75] fait appel aux méthodes spectrales. Bien qu'une méthode spectrale n'ait pas nécessairement besoin d'être définie sur un maillage, la discussion est ici restreinte à ce type de méthodes. Leur principal intérêt est de calculer avec une très grande précision les dérivées des plus petites échelles ; en effet, l'erreur de dispersion/dissipation associée à ces méthodes est nulle jusqu'au mode de coupure ($K = \pi/h$ où K désigne le nombre d'onde et h le pas d'espace du maillage). Une décomposition en modes de Fourier est généralement utilisée dans les directions d'homogénéité (qui existent au nombre de deux ou trois dans les DNS temporelles), tandis que dans les directions inhomogènes, il est souvent fait appel à une décomposition en polynômes de Chebishev. Il existe en réalité deux types de méthodes spectrales : les méthodes spectrales proprement dites, et les méthodes pseudo-spectrales. Les premières calculent dans l'espace spectral les termes non linéaires des équations de Navier-Stokes, ce qui revient à évaluer des produits de convolution par sommation sur toutes les triades ; le temps de calcul correspondant est assez important. Les méthodes pseudo-spectrales n'utilisent quant à elles le plan spectral que pour évaluer les dérivées spatiales et les termes non linéaires sont évalués par simple multiplication dans l'espace physique. L'usage de telles méthodes (qui nécessitent le passage d'un espace à l'autre à chaque itération) a été rendu possible grâce à l'algorithme de transformée de Fourier rapide² [20], qui réduit le coût de calcul d'une transformée de Fourier à $n \log n$ opérations (n désignant le nombre de nœuds du maillage). Bien que les méthodes spectrales ne souffrent pas d'erreurs de dispersion/dissipation, elles ne sont cependant pas exactes car des erreurs dites d'*aliasing* surviennent lors du calcul des termes non linéaires. Dans les équations de Navier-Stokes pour le cas compressible, la division par la densité ainsi que la dépendance en température de la viscosité s'avèrent être deux autres sources d'erreurs d'*aliasing*. Ces erreurs correspondent à l'apparition d'échelles plus petites que la résolution du maillage lorsque l'on multiplie deux fonctions représentées sur un maillage discret. Elles sont la cause d'instabilité numérique, mais aussi d'une décroissance excessive de la turbulence, comme l'ont montré Kim *et al.* [54] qui ont

²Malheureusement, cet algorithme n'est applicable qu'à des maillages uniformes et quelques autres cas particuliers.

dû supprimer ces erreurs (*dealiasing*) dans leur calcul d'écoulement turbulent en canal sous peine de voir la turbulence décroître. Les erreurs d'*aliasing* peuvent être éliminées en utilisant la “règle des 3/2” ou en effectuant les calculs sur des maillages décalés. Pour une description complète des méthodes spectrales, le lecteur peut se référer à l'ouvrage [12]. Les erreurs d'*aliasing* se manifestent également avec les méthodes aux différences finies, où l'emploi de la forme dite *skew-symmetric*³ pour les termes non linéaires dans les schémas aux différences finies centrés minimise ces erreurs, à la fois en incompressible et en compressible.

Les méthodes spectrales ont pendant longtemps régné sur la DNS en raison de leur très grande précision par rapport aux approches de type différences finies. Elles constituent encore aujourd'hui le “meilleur” choix dans les cas d'écoulements simples (incompressibles, par exemple) et homogènes. Même si des développements récents sur les éléments spectraux apportent la possibilité d'une très grande précision sur des géométries complexes [76], [17], [37], les méthodes spectrales classiques restent limitées aux géométries simples.

Pour leur part, les méthodes aux différences finies offrent une grande généralité permettant de s'attaquer à des géométries complexes [84]. Elles sont en contrepartie caractérisées par une importante erreur de dispersion aux grands nombres d'onde, rendant considérablement délicat le traitement des petites échelles de la turbulence. En revanche, il est possible de construire des schémas aux différences finies non dissipatifs. C'est en fait le cas de tous les schémas centrés. Avec ce type de discrétisation, l'erreur est uniquement dispersive, si bien que la taille des structures dissipatives de l'écoulement n'est pas modifiée, et donc le nombre de Reynolds n'est pas artificiellement diminué. Des schémas aux différences finies avec une faible erreur de dispersion associée ont été proposés pour les DNS en situation inhomogène. Il s'agit des schémas compacts [60]. Ils ont la particularité d'être implicites en espace, c'est-à-dire que la dérivée f'_i au nœud i dépend des valeurs de la fonction en tous les points du maillage :

$$af'_{i-1} + bf'_i + cf'_{i+1} = \alpha f'_{i-1} + \gamma f'_{i+1} \quad (3.1)$$

Cette formulation permet des ordres élevés (ordre six couramment utilisé), mais nécessite l'inversion d'une matrice bande à chaque itération. Elle reste toutefois beaucoup plus souple d'utilisation que les formulations spectrales. Les DNS en situations compressibles constituent le domaine d'application privilégié des formulations compactes. Récemment, la généralisation aux maillages non uniformes a été proposée [32].

Dans des cas simples, où la comparaison entre méthodes spectrales et méthodes aux différences ou volumes finis est possible, on montre que ces dernières sont à même de fournir des résultats physiquement acceptables. Notamment, les structures cohérentes et les statistiques de faible ordre dans un écoulement de canal pleinement turbulent sont bien reproduites par un code de calcul basé sur un schéma centré d'ordre deux en espace et pour une résolution semblable à celle utilisée par un code spectral. Pour une grille deux fois plus fine, on considère souvent qu'un schéma centré d'ordre deux en espace donne des résultats très proches de ceux issus d'une méthode spectrale. La nécessité de disposer d'une

³Elle s'écrit $\frac{1}{2}u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{1}{2} \frac{\partial u_j u_i}{\partial x_j}$.

méthode peu dissipative pour effectuer une DNS interdit par contre l'emploi de schémas fortement décentrés et robustes. Même pour des schémas décentrés d'ordre élevé, la nature dissipative est gênante. La DNS de *Rai & Moin* [83] réalisée avec un schéma *upwind* d'ordre cinq donne des résultats moins satisfaisants que le même calcul effectué avec un schéma centré d'ordre deux.

Le fait que la qualité des résultats ne soit pas directement fonction de l'ordre du schéma est une caractéristique propre à la DNS (et d'avantage encore à la LES). Les simulations de type RANS sont quant à elles généralement de qualité d'autant meilleure que le schéma est précis. En l'absence de critère simple pour décider a priori de la qualité d'une discrétisation spatiale donnée, il est prudent de tester la méthode numérique envisagée. Les tests suivants permettent habituellement d'avoir une bonne idée de la qualité d'un schéma (liste non exhaustive) :

- simulation d'une instabilité hydrodynamique : couche de mélange (instabilités de Kelvin-Helmholtz), couche limite ou canal (Orr-Sommerfeld), par exemples ;
- simulation d'une turbulence homogène isotrope à très grand nombre de Reynolds.

Mis à part l'ordre du schéma qui n'est pas très adapté pour la DNS et la LES, les erreurs de différenciation peuvent être quantifiées grâce à la notion de nombre d'onde. Considérons un mode de Fourier $f = e^{ikx}$ sur un domaine monodimensionnel de longueur 2π , discrétisé par un maillage uniforme comportant $n + 1$ points. La taille des mailles est alors $h = 2\pi/n$. La dérivée exacte de f au nœud d'indice j est ike^{ikx_j} . La dérivée obtenue numériquement est de la forme $ik'e^{ikx_j}$, où k' est une fonction de k et h . k' est appelé le nombre d'onde modifié⁴ pour l'opérateur de dérivée première. L'écart entre k' et k donne une information sur l'erreur de différenciation plus complète que l'ordre du schéma car elle est liée à la longueur d'onde du mode considéré. L'erreur du schéma aux différences finies est d'autant plus grande que le paramètre hk est grand, c'est-à-dire que le nombre de points de maillage utilisés pour discrétiser le mode de Fourier est petit. D'une manière générale, le nombre d'onde modifié est complexe pour un schéma dissipatif, réel pour un schéma non dissipatif mais dispersif.

Schéma en temps

L'avancement temporel s'effectue généralement à l'aide de méthodes semi-implicites. Les termes non linéaires sont traités de manière explicite par des méthodes de type Adams-Bashforth (second ordre), ou *leapfrog*, ou Runge-Kutta⁵, alors que les termes visqueux le sont en implicite, avec un schéma de Cranck-Nicolson par exemple (second ordre). Ce traitement implicite est motivé par la volonté de s'affranchir de la condition de Fourier qui apparaît pour des maillages très resserrés et qui impose au pas de temps de diminuer

⁴Par exemple, pour le schéma aux différences finies centré d'ordre deux discrétisant l'opérateur de dérivée première, on trouve que $k' = \sin kh/h$.

⁵En général, pour un ordre de précision donné, les méthodes de type Runge-Kutta demandent plus de calculs par pas de temps. Malgré cela, elles produisent des erreurs plus faibles que leurs méthodes concurrentes, ce qui les rend attractives. En pratique, elles autorisent un pas de temps plus grand pour la même précision [30].

comme h^2 , où h est la taille des cellules du maillage. Une fois libéré de cette condition visqueuse de stabilité, le pas de temps n'est plus limité que par une condition classique de type CFL, qui n'est pas quadratique mais linéaire en h .

L'analyse de Von Neumann est le plus souvent utilisée pour quantifier l'erreur associée au schéma spatio-temporel. Considérons à cet effet l'équation de convection $df/dt + cdf/dx = 0$ sur un domaine monodimensionnel et périodique. La solution pouvant être décomposée en modes de Fourier, considérons son évolution pour une onde monochromatique de la forme $f = \hat{f}e^{ikx}$. L'application du schéma de discrétisation spatiale permet d'obtenir $d\hat{f}/dt = -ick'\hat{f}$ où k' désigne le nombre d'onde modifié. On peut alors évaluer le rapport d'amplification complexe $A = \hat{f}^{n+1}/\hat{f}^n$, défini comme le rapport de la solution à deux pas de temps consécutifs. Le module de A (noté $|A|$) doit être inférieur à l'unité pour garantir la stabilité de la méthode numérique : c'est le critère de Von Neumann. En DNS (et en LES), la dissipation, qui est d'autant plus grande que $|A|$ est petit devant l'unité, doit être évitée au maximum. Cela conduit à rechercher des méthodes numériques dont le rapport d'amplification est le plus proche de l'unité⁶ en module sans toutefois dépasser cette limite pour des raisons de stabilité. La limite de stabilité du schéma est d'autant plus basse que l'ordre du schéma est élevé. Par ailleurs, la dissipation augmente fortement avec le nombre CFL. Il est donc important dans une DNS de ne pas travailler avec un pas de temps trop proche du critère de stabilité pour ne pas introduire de dissipation artificielle dans le calcul.

3.2.3 Conditions initiales

Dans le cas d'une DNS temporelle, le problème résolu est un problème aux conditions initiales. Le principe de la simulation est de faire évoluer en temps un champ tridimensionnel plus ou moins physique jusqu'à ce que les solutions obtenues deviennent indépendantes de la condition initiale. Le choix des conditions initiales est tout un art. Il n'existe pas de formulation unique applicable à tous les types d'écoulement. Le temps physique à simuler doit être de l'ordre de grandeur du temps caractéristique des grosses structures.

Dans certaines configurations, les conditions sont telles qu'il existe une production de turbulence, si bien que l'on peut atteindre effectivement, à partir d'un temps physique assez grand, une décorrélation complète des solutions obtenues et du champ initial. C'est par exemple le cas des simulations d'écoulement en conduite, dans lesquelles le frottement imposé par la condition d'adhérence à la paroi produit de la turbulence. Dans ces situations, la forme du champ initial importe peu. Pour un écoulement en conduite, le champ initial de vitesse pourra être la superposition de la solution laminaire (écoulement de Poiseuille) et de perturbations aléatoires dans une, deux ou trois directions. Il existe cependant des cas où une telle initialisation n'est pas suffisante car trop "rustique". La prescription de perturbations aléatoires sur les composantes de la vitesse peut induire une forte production de bruit acoustique qui peut, soit entâcher pendant longtemps les champs turbulents obtenus,

⁶Dans les simulations stationnaires de type RANS, on cherche au contraire à minimiser A dans les hautes fréquences, afin d'amortir le plus rapidement possible les instabilités qui gênent la convergence.

soit mettre en péril la stabilité numérique de la simulation. Il peut également arriver que le phénomène étudié ait un temps caractéristique équivalent au temps de retournement de la turbulence environnante⁷, si bien que la solution initiale doit présenter de bonnes qualités turbulentes.

La turbulence homogène isotrope est la situation pour laquelle il est le plus simple de construire des conditions initiales : il suffit de créer $\hat{u}_i(k)$ dans l'espace de Fourier. Se donner le spectre fixe l'amplitude $|\hat{u}_i(k)|$ du mode de Fourier, puis la condition de continuité $k \cdot \hat{u}_i(k)$ impose une restriction supplémentaire sur le mode, et le choix d'un angle de phase permet de finaliser $\hat{u}_i(k)$. La simulation doit durer environ deux temps de retournement pour qu'elle représente une turbulence réelle.

Pour certains écoulements, les conditions initiales sont des solutions issues d'autres calculs. Par exemple, le calcul de la turbulence homogène soumise à une contrainte est initialisé avec une solution turbulente isotrope. Pour un écoulement dans un canal aux parois curvilignes, une solution d'écoulement turbulent pleinement développé en canal plan sert de solution de départ.

3.2.4 Conditions aux limites

Les DNS spatiales nécessitent la prescription de conditions limites d'entrée et de sortie du fluide, ce qui n'est en principe pas le cas des DNS temporelles. Si les conditions classiques de murs isothermes ou adiabatiques ne posent plus aujourd'hui de problèmes particuliers, il n'en est pas de même pour les conditions limites de sortie et d'entrée de fluide.

Conditions de sortie

Les conditions de sortie présentent des difficultés encore non complètement résolues aujourd'hui. Le problème est d'être en mesure de faire sortir une structure turbulente du domaine de calcul sans générer de perturbations d'ordre numérique susceptibles de déstabiliser de manière significative l'ensemble du domaine de calcul. De nombreuses conditions limites convectives ont été proposées dans la littérature, mais aucune ne s'avère satisfaisante. Une approche plus pragmatique est donc de plus en plus adoptée : elle consiste à utiliser les conditions limites les plus performantes et à les associer à une zone tampon destinée à amortir au maximum les structures tourbillonnaires avant leur sortie du domaine de calcul.

Conditions d'entrée

La condition limite d'entrée d'une DNS peut largement conditionner le résultat du calcul. Des comparaisons entre expériences et DNS ont montré qu'il est certainement nécessaire d'introduire une partie aléatoire dans les conditions limites amont des DNS spatiales, afin d'obtenir des simulations représentatives d'écoulements turbulents.

⁷Le temps de retournement de la turbulence est essentiellement l'échelle de temps intégrale ou l'échelle de longueur intégrale divisée par la valeur rms de la vitesse.

Dans certaines applications, une DNS temporelle de type conduite pleinement développée peut être menée de front avec la DNS spatiale principale, lorsque celle-ci exige des conditions limites amont très réalistes. Par exemple, pour effectuer une DNS d'un écoulement au-dessus d'une marche descendante, il est souhaitable de produire en parallèle une DNS temporelle d'une couche limite, de manière à générer les bonnes conditions limites fluctuantes amont. Le champ de turbulence issu de la DNS temporelle est alors injecté dans le domaine de la DNS spatiale en invoquant l'hypothèse de Taylor⁸.

La génération de "bonnes" conditions limites amont demeure un sujet de recherche ouvert en DNS et en LES. En particulier, il n'existe pas de bonne solution dans le cas d'une géométrie complexe où une DNS temporelle homogène ne peut être utilisée comme générateur de fluctuations turbulentes.

3.3 Apports de la DNS

La DNS n'est pas une technique numérique destinée à fournir une solution des équations de Navier-Stokes pour tout problème d'ingénierie. Elle n'est pas faite pour reproduire à l'identique les configurations, qui sont complexes de par leur géométrie, de par les phénomènes physiques mis en jeu et leurs interactions. Au contraire, la DNS est un outil de recherche. En résolvant les équations de Navier-Stokes qui régissent un écoulement turbulent "simple", sans utiliser de modèle de turbulence, elle apporte des informations fines sur la physique de l'écoulement étudié. Ces données permettent une analyse minutieuse et une compréhension profonde des phénomènes physiques présents. Cette connaissance détaillée de la physique est primordiale pour étudier des configurations de plus en plus compliquées, telles celles rencontrées dans l'industrie.

Quelques exemples d'utilisation de la DNS, qui font ressortir les atouts et les apports de ce type de simulation, sont présentés ici.

3.3.1 Turbulence homogène isotrope

La turbulence homogène isotrope constitue un cas de base de la turbulence. A ce titre, il a été le premier à être étudié numériquement par simulation directe (travaux de Rogallo [86]). Le domaine de calcul est cubique et des conditions de périodicité sont appliquées dans les trois directions de l'espace. Les statistiques sont donc réalisées par moyenne spatiale en x , y et z . Les moments obtenus sont fonction du temps car, le champ de vitesse moyenne étant nul (ou uniforme), la production de turbulence est nulle et l'énergie cinétique turbulente k est une fonction décroissante du temps t . Expérimentalement, on trouve :

$$\frac{k(t)}{k(0)} \simeq t^n \quad (3.2)$$

où n est une constante de l'ordre de 1.4. Ce comportement peut être retrouvé analytiquement à partir d'une théorie linéarisée ([61]). Les DNS de turbulence homogène isotrope sont

⁸L'hypothèse de Taylor permet de passer des échelles de temps aux échelles de longueur.

généralement effectuées à l'aide de méthodes spectrales, car la simplicité de la géométrie et l'absence de conditions limites rendent ces méthodes efficaces. Les plus grosses simulations sont basées sur des maillages 512^3 et 1024^3 , et permettent de simuler un nombre de Reynolds construit sur la micro-échelle de Taylor de l'ordre de cent. Ce n'est pas suffisant pour observer une zone inertielle avec un spectre en $k^{-5/3}$ comme suggéré par Kolmogorov, c'est pourquoi la majorité des DNS de turbulence homogène isotrope sont faites en mode forcé : de l'énergie est ajoutée dans les premiers modes (basses fréquences) afin d'obtenir une situation statistiquement stationnaire. Le forçage mime le transfert d'énergie venant des très grandes échelles dans une turbulence de grille physique. Ces grandes échelles ne pouvant pas être résolues en raison des contraintes sur le temps de calcul, leurs effets sont pris en compte par un apport d'énergie externe sur les premiers modes. Cette approche se justifie par le fait que les petites structures doivent devenir indépendantes des détails du forçage si le nombre de modes (c'est-à-dire la séparation des échelles) est suffisamment grand. Cet artifice a permis de générer de nouvelles données sur la structure des petites échelles⁹. Des études ont montré que la vorticit  se concentre essentiellement dans des filaments dont le rayon varie comme l' chelle de Kolmogorov l_η et dont la longueur est donn e par l' chelle int grale L_i . On sait aujourd'hui que ces structures tubulaires sont caract ristiques de la turbulence, et non du type de forçage exerc  ou du spectre d' nergie. Par rapport   l'exp rience en laboratoire, la DNS offre la possibilit  de modifier une solution ou les  quations du mouvement, afin de tester et comprendre l'effet de tel ou tel ingr dient. Un champ de turbulence homog ne isotrope forc e a ainsi pu  tre filtr , de mani re   supprimer les tubes de vorticit  et prouver que ces structures organis es ne contribuent pratiquement pas   la dissipation globale des petites  chelles.

3.3.2 Canaux et couches limites

Les configurations de canaux et de couches limites sont assez simples pour effectuer des DNS temporelles repr sentatives de la physique  tudi e. Parmi les plus c l bres, on peut citer [54] pour les  coulements de canaux et [96] pour la couche limite. De nombreux ph nom nes physiques, tels l'injection et la succion pari tales ([99], [9]), les  coulements r actifs ([44]) ou encore les transferts de chaleur turbulents   divers nombres de Prandtl mol culaires ([46]), sont ainsi simul s et analys s gr ce   ces configurations. L'influence du nombre de Reynolds sur la zone interne d'un  coulement turbulent pleinement d velopp  en canal est  galement  tudi e ([66], DNS et donn es exp rimentales   bas-Reynolds [5], donn es exp rimentales [103]).

Dans le cas de la couche limite, l' coulement r el n'est pas homog ne dans la direction longitudinale. De mani re   pouvoir tout de m me appliquer des conditions limites p riodiques dans cette direction et effectuer une DNS temporelle, les  quations de Navier-Stokes ont  t  r solues sous une forme l g rement modifi e dans la DNS [96]. Ceci illustre l'un des avantages de la DNS par rapport   l'exp rience classique en laboratoire,   savoir la facult 

⁹Il est   noter que dans ces simulations, les petites  chelles sont r solues tandis que les grandes sont mod lis es, contrairement   la LES.

d'isoler le problème ou la partie des équations que l'on souhaite étudier.

Ces DNS temporelles nécessitent l'introduction d'une force en volume, sous la forme d'un gradient de pression ou d'un terme source, qui permet au fluide de s'écouler malgré les forces de frottement pariétales tendant à l'immobiliser. Une fois l'équilibre statistique atteint, le débit passant dans le canal ou au-dessus de la plaque plane induit un frottement moyen exactement égal en module à l'intégrale volumique de la force motrice spécifiée. Le nombre de Reynolds exact de la simulation est donc plus un résultat du calcul qu'un paramètre d'entrée. Lorsqu'on arrive à un état statistiquement convergé, des moyennes temporelles sont effectuées pendant un temps physique représentatif des phénomènes turbulents mis en jeu. Pour le canal, c'est le temps de diffusion turbulente, noté τ_{Dt} , qui est significatif. Il est caractéristique de l'effet de la turbulence sur la demi-hauteur h du canal et s'exprime par le rapport h/u_τ , où u_τ désigne la vitesse de frottement. Celle-ci est calculée à partir du frottement pariétal τ_w , grâce à la formule $u_\tau^2 = \tau_w/\rho$. Les moyennes temporelles peuvent être complétées par des moyennes spatiales suivant les directions homogènes de l'écoulement. Les traitements statistiques rendent possible la vérification d'hypothèses souvent utilisées dans les développements physiques, telles l'existence d'une loi logarithmique pour la vitesse, l'équilibre entre la production et la dissipation dans la zone pleinement turbulente.

Un autre avantage de la DNS vis-à-vis de l'expérience en laboratoire est de pouvoir mesurer "tout ce que l'on veut", sans intrusion dans l'écoulement, car chaque nœud du maillage peut être assimilé à une sonde parfaite de n'importe quelle grandeur physique. Les erreurs en DNS proviennent de la génération de la base de données, alors que dans les expériences la réalité de la physique est disponible mais souvent très difficilement mesurable.

3.4 La présente étude

Ce travail s'inscrit dans la continuité d'une partie de la thèse [24] (effectuée pour Snecma-Moteurs, site de Vernon), dont l'un des objectifs était la dérivation d'une loi de paroi permettant de prendre en compte de forts gradients de température, ainsi que des nombres de Mach potentiellement élevés, deux éléments caractéristiques des écoulements dans les moteurs-fusées. Grâce à des simulations numériques directes disponibles dans la littérature ([73] et [18]), les phénomènes physiques mis en jeu ont été mieux compris. Cela a mené à la dérivation d'une loi de paroi couplée vitesse-température, valable pour des nombres de Mach élevés ($0 < Ma < 4$) et des variations de température importantes ($1 < T_{\text{gaz}}/T_w < 4$). Cette loi a été testée sur des cas proposés par Snecma-Moteurs (site de Vernon) et l'écart entre les flux convectifs calculés et ceux mesurés a été alors réduit d'un facteur quatre à cinq (par rapport à la formulation logarithmique classiquement utilisée). Cette loi de paroi couplée vitesse-température a été développée sous l'hypothèse d'un mélange homogène dont la composition ne dépend pas de la température.

La présente thèse se propose, d'une part d'étendre cette loi de paroi au cas plus réaliste d'un mélange gazeux multi-espèce, d'autre part de simuler l'ablation des parois en carbone de la

tuyère afin de connaître l'effet de ce phénomène sur le flux de chaleur pariétal. Le modèle de paroi donnera ainsi accès aux transferts de quantité de mouvement, de chaleur et de masse pour chaque espèce à partir de la connaissance de quantités moyennes à l'extérieur de la zone de proche paroi. Plusieurs difficultés supplémentaires apparaissent alors :

- la capacité calorifique à pression constante C_p n'est plus une donnée. L'hypothèse " C_p constant" avait été faite en [24] car en pratique C_p ne dépend que faiblement de la température. Par contre, C_p peut varier beaucoup si la composition chimique du mélange change de manière importante et si les composants ont des masses molaires très différentes (comme CO_2 et H_2) ;
- les espèces gazeuses contenues dans le mélange éjecté par la tuyère réagissent chimiquement entre elles : il faut donc construire un schéma cinétique capable de reproduire les changements de concentration des différentes espèces ;
- de plus, les espèces oxydantes du mélange gazeux éjecté attaquent le revêtement en carbone de la tuyère : c'est le phénomène d'ablation des parois. Cela engendre une récession de leur surface avec pour conséquences une diminution de l'épaisseur du matériau isolant, ainsi qu'une altération de la poussée. Il faut donc aussi modéliser ces réactions hétérogènes. Dans la DNS avec ablation, il est indispensable de reproduire la vitesse d'injection adimensionnée V_{inj}^+ rencontrée dans la tuyère de Snecma Propulsion Solide, car c'est ce paramètre qui mesure l'effet du soufflage sur l'écoulement pariétal [93]. La vitesse V_{inj}^+ est définie par $V_{inj}^+ = V_{inj}/u_\tau$, où V_{inj} désigne la vitesse d'injection des gaz issus de l'ablation des parois en carbone, et u_τ la vitesse de frottement ;
- le flux de chaleur q résulte de deux contributions distinctes : celle liée au gradient de température (terme classique de la loi de Fourier : $q_1 = -\lambda\nabla T$) et celle liée à la diffusion des espèces et qui existe dès lors que la composition chimique du mélange n'est pas homogène au voisinage de la paroi (terme $q_2 = \rho \sum_{i=1}^{ns} h_i Y_i V_i$, où h_i désigne l'enthalpie massique de l'espèce i , Y_i sa fraction massique et V_i sa vitesse de diffusion). Il est donc nécessaire, dans le cas d'un mélange à composition chimique variable, de trouver une loi de comportement réaliste pour ce terme également.

Les flux pariétaux dépendent de tous les détails de l'écoulement, de la paroi jusqu'à la zone turbulente. Afin de déterminer les effets importants de la zone pariétale et de les prendre en compte dans la loi de paroi, il est indispensable de disposer de données précises et détaillées. Les mesures expérimentales ne peuvent fournir de telles données car la couche limite qui se développe dans la tuyère est très mince (environ 1.4 mm), et, la pression et la température atteignent des valeurs très élevées¹⁰. Certaines techniques de mesure derrière une paroi permettent d'accéder aux flux par méthodes inverses, mais il n'existe pratiquement pas de technique de mesure fiable et précise du flux global et du flux de rayonnement en présence d'un écoulement diphasique très chaud (cas des protections thermiques internes de propulseur à poudre). Seule la simulation numérique directe, qui

¹⁰Dans le convergent de la tuyère : $P = 10$ MPa, $T_w = 2700$ K, $T_{gaz} = 3400$ K à 3500 K.
 Au col de la tuyère : $P = 6$ MPa, $T_w = 3200$ K, $T_{gaz} = 3300$ K à 3400 K.
 Dans le divergent de la tuyère : $P = 1$ MPa, $T_w = 2700$ K, $T_{gaz} = 2800$ K.

consiste à résoudre sans aucune modélisation les équations de la mécanique des fluides, est en mesure de procurer de telles données.

De par sa simplicité (géométrie, conditions limites), le cas du canal périodique a été largement étudié en DNS et a été retenu dans le cadre de cette étude. Il permet de créer un écoulement pariétal turbulent. La figure 3.3 illustre, et replace dans le contexte industriel, les DNS de canaux plans tridimensionnels réalisées au cours de cette thèse.

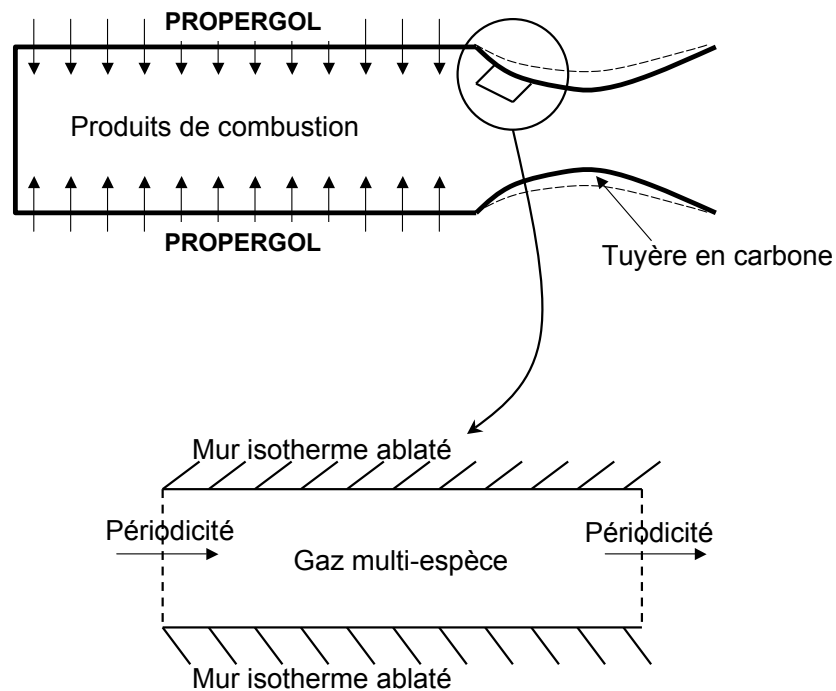


Fig. 3.3: Configuration de nos DNS

La présence de deux parois ne remet pas en cause la pertinence du choix du canal plan, car la zone logarithmique qui se développe est assez indépendante de ce qui se passe en dehors de cette zone. Une couche limite suit en effet une loi logarithmique, qui est la même qu'il s'agisse d'un canal, d'une conduite ou d'une plaque plane. D'autre part, les effets de courbure sont négligeables, car l'épaisseur de la zone logarithmique est très inférieure au rayon de courbure de la tuyère.

Les DNS effectuées reproduisent les paramètres physiques suivants, rencontrés dans la tuyère de Snecma Propulsion Solide : pression, température de paroi, gradient de température dans la couche limite, densité du mélange gazeux (simulation des changements de concentration des espèces du mélange gazeux éjecté par la tuyère). De plus, la DNS avec ablation simule la vitesse d'injection adimensionnée V_{inj}^+ rencontrée dans la tuyère de Snecma Propulsion Solide.

Dans le convergent de la tuyère, l'écoulement est largement subsonique. Afin d'éliminer les effets de compressibilité et de travailler avec un pas de temps pas trop petit, on choisit de

simuler un écoulement à Mach 0.2. Le coût numérique d'une DNS étant directement lié au nombre de Reynolds de l'écoulement (*cf* paragraphe 1.4.2 de la partie I), il n'est pas envisageable d'adopter pour la DNS le nombre de Reynolds de frottement Re_τ réel (Re_τ est défini par $Re_\tau = (u_\tau h)/\nu$ où h désigne la demi-hauteur du canal et ν la viscosité cinématique); on opte ainsi pour la valeur de 180, classiquement utilisée dans la littérature [54]. Les nombres de Mach et de Reynolds de frottement étant fixés, on détermine la taille du domaine de calcul.

Toutes les DNS de cette thèse ont été réalisées avec le code de calcul AVBP (annexe A). Nous avons pris le parti d'utiliser un code de calcul existant, destiné à la LES et à la DNS en milieux réactifs, et largement validé en turbulence instationnaire. AVBP n'utilise pas de méthode spectrale, mais des schémas volumes finis qui sont très peu dissipatifs [19]. Rappelons que le caractère faiblement dissipatif du schéma numérique est une caractéristique très importante en DNS.

Chapitre 4

Modélisation d'un mélange gazeux multi-espèce réactif

4.1 Equations de transport

Les équations qui régissent les écoulements turbulents gazeux multi-espèces, réactifs et compressibles, sont données dans cette section. Elles expriment la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie.

4.1.1 Conservation de la masse

Comme pour les écoulements non réactifs, l'équation de conservation de la masse totale s'écrit :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (4.1)$$

L'équation de conservation de la masse pour chaque espèce k ($k \in \{1, \dots, ns\}$) s'écrit quant à elle :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k (u_i + V_{k,i})) = \dot{\omega}_k \quad (4.2)$$

où Y_k désigne la fraction massique de l'espèce k , $V_{k,i}$ la $i^{\text{ème}}$ composante de la vitesse de diffusion \mathbf{V}_k de l'espèce k et $\dot{\omega}_k$ le taux de production massique de l'espèce k .

La conservation de la masse totale implique que \mathbf{V}_k et $\dot{\omega}_k$ vérifient les relations suivantes :

$$\sum_{k=1}^{ns} Y_k \mathbf{V}_k = 0 \quad (4.3)$$

et

$$\sum_{k=1}^{ns} \dot{\omega}_k = 0 \quad (4.4)$$

Comme nous le verrons à la section 4.4, la difficulté réside dans l'évaluation du flux de diffusion $\rho Y_k \mathbf{V}_k$ de chaque espèce k .

4.1.2 Conservation de la quantité de mouvement

Pour un écoulement non réactif et en l'absence de forces extérieures par unité de masse agissant sur les espèces, l'équation de conservation de la quantité de mouvement s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} \quad (4.5)$$

où p désigne la pression thermodynamique, et où le tenseur visqueux τ_{ij} est défini par :

$$\tau_{ij} = \left(\eta - \frac{2}{3}\mu\right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right) \quad (4.6)$$

avec η la viscosité en volume.

Le tenseur σ_{ij} est donné par :

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij} \quad (4.7)$$

Pour un écoulement réactif dans le régime dit des "réactions tempérées", un terme supplémentaire d'origine chimique apparaît dans l'équation (4.5) ([26]). Ce terme, rarement mentionné, n'est pas pris en compte dans cette étude.

Dans le code AVBP utilisé pour réaliser les DNS exposées dans cette thèse, la viscosité en volume η est nulle, car elle est considérée comme négligeable. Dans nos DNS, l'écoulement simulé étant subsonique, le terme en divergence de la vitesse est très petit comparé au terme de viscosité $\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i}\right)$. De plus, il s'ajoute à la pression.

4.1.3 Conservation de l'énergie

L'énergie totale e_t pour un mélange gazeux multi-espèce est définie par :

$$e_t = \int_{T_0}^T C_v dT - \frac{RT_0}{W} + \sum_{k=1}^{ns} Y_k \Delta h_{f,k}^0 + \frac{1}{2} u_i u_i \quad (4.8)$$

avec C_v la capacité calorifique à volume constant du mélange, W la masse molaire du mélange et $\Delta h_{f,k}^0$ l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température de référence T_0 . En l'absence de forces extérieures par unité de masse agissant sur les espèces, l'équation de conservation de l'énergie totale e_t s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho e_t) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i e_t) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \frac{\partial \sigma_{ij} u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} \quad (4.9)$$

avec q_i le flux de chaleur défini par l'équation (4.13) de la section 4.2, et \dot{Q} le terme source de chaleur¹ dû par exemple à une étincelle, un laser ou un flux radiatif.

¹Le terme \dot{Q} est différent de la chaleur dégagée par les réactions chimiques, notée $\dot{\omega}_T$.

4.2 Flux de transport

Les flux de transport sont représentés par le tenseur $(\sigma_{ij})_{i,j \in \{1,2,3\}}$, la vitesse de diffusion \mathbf{V}_k de l'espèce k et le flux de chaleur \mathbf{q} . D'après la théorie cinétique des mélanges gazeux polyatomiques dilués, ils peuvent être écrits, en première approximation, suivant le développement d'Enskog-Chapman en termes de différents coefficients de transport, tels la viscosité volumique η , la viscosité dynamique μ , la matrice de diffusion $\mathbf{D} = (D_{kl})_{k,l \in \{1,\dots,ns\}}$, le rapport de diffusion thermique $\chi = (\chi_k)_{k \in \{1,\dots,ns\}}$ et la conductivité thermique λ . Plus précisément :

- le tenseur $(\sigma_{ij})_{i,j \in \{1,2,3\}}$ s'exprime par la relation (4.7), à savoir ([26], [35]) :

$$\sigma_{ij} = -p\delta_{ij} + \left(\eta - \frac{2}{3}\mu\right) \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (4.10)$$

- la $i^{\text{ème}}$ composante de la vitesse de diffusion \mathbf{V}_k de l'espèce k est donnée par ([26], [35]) :

$$V_{k,i} = - \sum_{l=1}^{ns} D_{kl} \left(d_{l,i} + \chi_l \frac{\partial \ln T}{\partial x_i} \right), \quad k \in \{1, \dots, ns\} \quad (4.11)$$

où le vecteur $(d_{k,i})_{k \in \{1,\dots,ns\}, i \in \{1,2,3\}}$ intègre les effets des gradients de fractions massiques et de pression et s'écrit :

$$d_{k,i} = \frac{\partial X_k}{\partial x_i} + (X_k - Y_k) \frac{1}{p} \frac{\partial p}{\partial x_i} \quad (4.12)$$

en l'absence de forces extérieures par unité de masse agissant sur les espèces ;

- la $i^{\text{ème}}$ composante du flux de chaleur \mathbf{q} s'écrit ([26], [35]) :

$$q_i = \sum_{k=1}^{ns} \rho h_k Y_k V_{k,i} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + p \sum_{k=1}^{ns} \chi_k V_{k,i} \quad (4.13)$$

où h_k désigne l'enthalpie² de l'espèce k .

Dans l'équation (4.11) de la vitesse de diffusion \mathbf{V}_k de l'espèce k , le premier terme est lié à la diffusion moléculaire des espèces et le second terme à l'effet Soret.

Dans l'équation (4.13) du flux de chaleur, le premier terme représente le transfert d'énergie dû à la diffusion moléculaire, le second la loi de Fourier et le troisième l'effet Dufour.

Dans cette étude, l'effet Soret et le terme de gradient de pression sont négligés, ce qui conduit à la formulation suivante pour le flux de diffusion \mathcal{F}_k de l'espèce k :

$$\mathcal{F}_k \equiv \rho Y_k \mathbf{V}_k = - \sum_{l=1}^{ns} \rho Y_k D_{kl} \nabla X_l \quad (4.15)$$

²L'enthalpie h_k de l'espèce k est définie par :

$$h_k = \int_{T_0}^T C_{p,k} dT + \Delta h_{f,k}^0 \quad (4.14)$$

avec $C_{p,k}$ capacité calorifique à pression constante de l'espèce k .

L'effet Dufour est également négligé, ce qui mène à un flux de chaleur q_i dans la direction i défini par :

$$q_i = \sum_{k=1}^{ns} \rho h_k Y_k V_{k,i} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (4.16)$$

D'après les équations (4.10) à (4.13), il apparaît que la modélisation détaillée d'un mélange gazeux polyatomique requiert l'évaluation de ses coefficients de transport. Ces coefficients sont fonction des variables d'état p , T et Y_1, \dots, Y_{ns} .

4.3 Systèmes linéaires de transport

La théorie cinétique des gaz ne fournit pas explicitement les coefficients de transport. Il est nécessaire de résoudre des systèmes linéaires, appelés systèmes linéaires de transport, et dont la taille peut être relativement grande (ns^2 pour les vitesses de diffusion \mathbf{V}_k de ns espèces gazeuses). La nécessité de calculer les coefficients de transport à chaque pas de temps et dans chaque cellule du maillage rend l'inversion numérique directe de ces systèmes très coûteuse. Les techniques itératives constituent donc une alternative intéressante, notamment lorsque le nombre d'espèces est élevé [29]. De plus, des expressions analytiques approchant les coefficients de transport peuvent être obtenues par troncatures. Dans [26], on montre que différents schémas itératifs convergent lorsqu'on applique la théorie des méthodes itératives à des systèmes linéaires singuliers sous contraintes et des matrices symétriques semi-définies positives. Ces résultats de convergence sont fortement liés aux propriétés mathématiques de l'équation de Boltzmann et à la structure de l'espace variationnel sélectionné pour les fonctions de distributions des espèces [27]. La théorie des systèmes linéaires de transport ne sera pas abordée, car elle dépasse largement les objectifs de cette thèse. D'autre part, des bibliothèques de programmes, telles EGLIB ([28]) ou CHEMKIN ([87]), permettent d'évaluer les coefficients de transport.

4.3.1 Contraintes physiques

Les coefficients de transport doivent satisfaire plusieurs propriétés mathématiques, qui sont importantes du point de vue de la thermodynamique.

(i) Symétrie de la matrice de diffusion :

$$D_{kl} = D_{lk}, \forall k, l \in \{1, \dots, ns\} \quad (4.17)$$

(ii) Conservation de la masse :

$$\sum_{k=1}^{ns} Y_k D_{kl} = 0, \forall l \in \{1, \dots, ns\} \quad \text{et} \quad \sum_{k=1}^{ns} \chi_k = 0 \quad (4.18)$$

Ces contraintes impliquent que les vitesses de diffusion satisfassent la relation $\sum_{k=1}^{ns} Y_k \mathbf{V}_k = 0$, qui exprime la conservation de la masse.

(iii) Production positive d'entropie :

La matrice de diffusion \mathbf{D} est semi-définie positive, *i.e.*, pour tout vecteur $\mathbf{x} = (x_k)_{k \in \{1, \dots, ns\}}$, on a $\langle \mathbf{D}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle \geq 0$. En outre, cette matrice est définie positive sur l'hyperplan des gradients dont la somme est nulle, *i.e.*, on a $\langle \mathbf{D}\mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle > 0$ pour $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ et tel que $\sum_{k=1}^{ns} x_k = 0$. De plus, la viscosité dynamique μ et la conductivité thermique λ sont positives. Enfin, la viscosité volumique η est positive seulement si le mélange comporte des espèces polyatomiques, et elle est négligeable sinon.

Il est important de noter que les coefficients de transport calculés avec la bibliothèque de programmes EGLIB ([28]) vérifient toujours les propriétés (i) à (iii).

4.3.2 Cas des fractions massiques qui tendent vers zéro

D'un point de vue numérique, il est important de comprendre le comportement mathématique et numérique des coefficients de transport lorsque certaines fractions massiques deviennent arbitrairement petites. En effet, des fractions massiques nulles conduisent à des singularités artificielles dans les systèmes linéaires de transport [35]. Ces singularités artificielles peuvent être éliminées en travaillant avec une version re-normée du système initial [26]. En particulier, lorsque la matrice de diffusion \mathbf{D} est remplacée par la matrice \mathbf{C} définie par $C_{kl} = \rho Y_k D_{kl}$, $k, l \in \{1, \dots, ns\}$, il est prouvé dans [26] que tous les coefficients de transport sont des fonctions rationnelles lisses des fractions massiques et qu'ils admettent une limite finie lorsque certaines fractions massiques tendent vers zéro.

4.4 Différentes modélisations de la vitesse de diffusion

4.4.1 Approche analytique

L'approche analytique consiste à développer en série la matrice de diffusion \mathbf{D} et à tronquer ce développement suivant la précision désirée et le coût accepté.

Notons \mathbf{Y} le vecteur de \mathbb{R}^{ns} défini par $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_{ns})^t$ et \mathbf{u} le vecteur de \mathbb{R}^{ns} défini par $\mathbf{u} = (1, \dots, 1)^t$.

La matrice de diffusion \mathbf{D} peut être développée en série sous la forme ([35]) :

$$\mathbf{D} = \sum_{n=0}^{\infty} (\mathbf{P}\mathbf{\Gamma})^n \mathbf{P}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{P}^t \quad (4.19)$$

\mathbf{P} désigne le projecteur sur \mathbf{Y}^\perp parallèlement à $\mathbb{R}\mathbf{u}$, c'est-à-dire $\mathbf{P} = \mathbf{I} - \mathbf{Y} \otimes \mathbf{u} / \langle \mathbf{Y}, \mathbf{u} \rangle$, où \mathbf{I} est la matrice identité et $\langle \cdot, \cdot \rangle$ le produit scalaire de \mathbb{R}^{ns} . $\mathbf{\Gamma}$ est une matrice d'itération et la matrice \mathbf{M}^{-1} est définie par

$$\mathbf{M}^{-1} = \text{Diag}(D_{1,mix}/X_1, \dots, D_{ns,mix}/X_{ns}) \quad (4.20)$$

avec $D_{k,mix}$ le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange défini par

$$D_{k,mix} = \frac{\sum_{l \neq k} Y_l}{\sum_{l \neq k} X_l / \mathcal{D}_{kl}^{bin}} \quad (4.21)$$

Pour la paire d'espèces (k, l) , \mathcal{D}_{kl}^{bin} est le coefficient de diffusion binaire de l'espèce k dans l'espèce l . \mathcal{D}_{kl}^{bin} ne dépend que de la température T et de la pression p . D'après la théorie cinétique des gaz, il s'écrit [?] :

$$\mathcal{D}_{kl}^{bin} = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k_B^3 T^3 / W_{kl}}}{p\pi\sigma_{kl}^2 \Omega_{kl}^{(1,1)*}} \quad (4.22)$$

où k_B est la constante de Boltzmann ($k_B = 1.38054 \times 10^{-23}$ J/K), σ_{kl} le diamètre de collision, $\Omega_{kl}^{(1,1)*}$ l'intégrale de collision réduite et W_{kl} la masse réduite de la paire d'espèces (k, l) . W_{kl} est donnée par la formule $W_{kl} = \frac{W_k W_l}{W_k + W_l}$, où W_k est la masse molaire de l'espèce k . Ces données sont disponibles dans la littérature.

Remarque : $\mathcal{D}_{kl}^{bin} = \mathcal{D}_{lk}^{bin} \forall k, l \in \{1, \dots, ns\}$

Pour k et l appartenant à l'ensemble $\{1, \dots, ns\}$, D_{kl} (coefficient de la matrice \mathbf{D}) est le coefficient de diffusion multicomposant de l'espèce k dans l'espèce l .

L'approximation $\mathbf{D}^{[m]}$, $m \geq 0$, de la matrice de diffusion est :

$$\mathbf{D}^{[m]} = \sum_{n=0}^m (\mathbf{P}\mathbf{\Gamma})^n \mathbf{P}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{P}^t \quad (4.23)$$

4.4.2 Approximation de Bird

L'approximation de Bird concerne les coefficients de diffusion binaire et suppose qu'ils peuvent s'écrire sous la forme

$$\mathcal{D}_{kl}^{bin} = \frac{\bar{D}}{F_k F_l} \quad (4.24)$$

où $\bar{D}(T, p)$ est un coefficient moyen de diffusion et $F_k(T)$ un paramètre relatif à l'espèce k , appelé facteur de diffusion, et dépendant faiblement de la température [50].

La référence [50] montre que, comparée aux valeurs calculées avec la théorie cinétique des gaz, la corrélation (4.24) fournit une bonne approximation des coefficients de diffusion binaire pour divers systèmes chimiques. Lorsque \bar{D} est pris égal au coefficient d'auto-diffusion de O_2 , les paramètres F_k sont raisonnablement bien corrélés par :

$$F_k = \left(\frac{W_k}{W_{ref}} \right)^\epsilon \quad (4.25)$$

avec $W_{ref} \approx 23.4$ and $\epsilon \approx 0.431$.

Cette approximation présente deux intérêts vis-à-vis du calcul du flux de diffusion \mathcal{F}_k de l'espèce k ($\mathcal{F}_k \equiv \rho Y_k \mathbf{V}_k$) :

- tout d’abord, seuls ns facteurs de diffusion sont nécessaires au lieu des $(ns^2 - ns)/2$ coefficients de diffusion binaire ;
- ensuite, \mathcal{F}_k peut s’exprimer uniquement à partir de propriétés relatives à l’espèce k et au mélange considéré dans son ensemble ([50]).

Cependant, celle-ci n’a pas de fondement théorique :

- les contraintes physiques présentées à la sous-section 4.3.1 ne sont pas réalisées ;
- la détermination des coefficients \bar{D} et F_k est empirique ([50]).

4.4.3 Approximation de Hirschfelder-Curtiss

L’approximation de Hirschfelder-Curtiss [39] est très souvent utilisée pour évaluer le flux de diffusion \mathcal{F}_k de l’espèce k et s’exprime par :

$$\mathcal{F}_k \equiv \rho Y_k \mathbf{V}_k = -\rho \frac{W_k}{\bar{W}} D_{k,mix} \nabla X_k \quad (4.26)$$

Notons que dans le cas d’un mélange gazeux binaire, la formule (4.26) redonne la loi de Fick (*i.e.* $Y_1 \mathbf{V}_1 = -\mathcal{D}_{12}^{bin} \nabla Y_1$), qui est exacte pour un tel mélange.

Afin de garantir la conservation de la masse totale et vérifier la contrainte (*ii*), il est indispensable d’ajouter une vitesse de correction, notée \mathbf{V}_{cor} , à la vitesse de convection $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)$ de l’équation de conservation de la masse relative à l’espèce k (équation (4.2)). Cette vitesse de correction s’écrit :

$$\mathbf{V}_{cor} = \sum_{k=1}^{ns} \frac{W_k}{\bar{W}} D_{k,mix} \nabla X_k \quad (4.27)$$

Le flux de diffusion \mathcal{F}_k de l’espèce k se calcule alors par la formule :

$$\mathcal{F}_k = -\rho \frac{W_k}{\bar{W}} D_{k,mix} \nabla X_k + \mathbf{V}_{cor} \quad (4.28)$$

L’approximation de Hirschfelder-Curtiss avec vitesse de correction constitue la meilleure approximation au premier ordre de la vitesse de diffusion \mathbf{V}_k de l’espèce k ([26], [35], [78]). Elle revient à employer la matrice de diffusion $\mathbf{D}^{[0]} = \mathbf{P}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{P}^t$, définie à la sous-section 4.4.1.

4.4.4 Conclusions

Dans cette étude, la matrice de diffusion \mathbf{D} est approchée par la matrice $\mathbf{D}^{[0]}$, ce qui revient à utiliser l’approximation de Hirschfelder-Curtiss avec vitesse de correction :

$$\mathcal{F}_k \equiv \rho Y_k \mathbf{V}_k = -\rho \left(\frac{W_k}{\bar{W}} D_{k,mix} \nabla X_k + Y_k \mathbf{V}_{cor} \right)$$

avec $\mathbf{V}_{cor} = \sum_{k=1}^{ns} \frac{W_k}{\bar{W}} D_{k,mix} \nabla X_k$.

Ce choix allie simplicité (seuls ns coefficients sont nécessaires, au lieu de $(ns^2 - ns)/2$) et réalisation des contraintes physiques exposées plus haut.

4.5 Cinétique chimique

Considérons un système chimique constitué de ns espèces gazeuses réagissant à travers M réactions :

$$\sum_{k=1}^{ns} \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{ns} \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \quad j = 1, M \quad (4.29)$$

avec \mathcal{M}_k symbole chimique de l'espèce k .

ν'_{kj} et ν''_{kj} représentent les coefficients stœchiométriques molaires de l'espèce k dans la réaction j . La conservation de la masse implique :

$$\sum_{k=1}^{ns} \nu'_{kj} W_k = \sum_{k=1}^{ns} \nu''_{kj} W_k, \quad j = 1, M \quad (4.30)$$

soit encore

$$\sum_{k=1}^{ns} \nu_{kj} W_k = 0, \quad j = 1, M \quad (4.31)$$

avec $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$.

4.5.1 Taux de réaction massique

Le taux de réaction massique $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est la somme des taux $\dot{\omega}_{kj}$ produits par les M réactions et s'exprime par la relation :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (4.32)$$

avec $\dot{\omega}_{kj}/(W_k \nu_{kj}) = \mathcal{Q}_j$, taux de progression de la réaction j .

Une telle formulation du taux de réaction $\dot{\omega}_k$ assure la conservation de la masse totale. En effet, on trouve :

$$\sum_{k=1}^{ns} \dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \left(\mathcal{Q}_j \sum_{k=1}^{ns} W_k \nu_{kj} \right) = 0 \quad (4.33)$$

d'après l'équation (4.31).

Le taux de progression \mathcal{Q}_j de la réaction j s'écrit :

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^{ns} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^{ns} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (4.34)$$

où $K_{f,j}$, resp. $K_{r,j}$, représente le taux d'avancement, resp. de régression, de la réaction j . La détermination des constantes $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ constitue un problème central en modélisation de la combustion. Elles sont généralement modélisées — c'est le cas dans le code AVBP — grâce à la loi d'Arrhénius :

$$K_{f,j} = A_{f,j} T^{\beta_j} \exp\left(\frac{-E_j}{\mathcal{R}T}\right) = A_{f,j} T^{\beta_j} \exp\left(\frac{-T_{a,j}}{T}\right) \quad (4.35)$$

avec pour énergie d'activation $E_j = \mathcal{R}T_{aj}$.

La constante $K_{r,j}$ est déduite de $K_{f,j}$ en utilisant l'hypothèse d'équilibre chimique, et s'écrit alors :

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (4.36)$$

où la constante d'équilibre K_{eq} (qui dépend de la réaction j) est définie selon [56] par :

$$K_{eq} = \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^{ns} \nu_{kj}} \exp \left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T} \right) \quad (4.37)$$

avec $p_0 = 1$ bar. ΔH_j^0 et ΔS_j^0 sont respectivement les variations d'enthalpie (sensible + chimique) et d'entropie pour la réaction j . Elles sont obtenues à partir de valeurs tabulées, et elles s'expriment respectivement par :

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^{ns} \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (4.38)$$

et

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^{ns} \nu_{kj} W_k s_k(T) \quad (4.39)$$

où $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie de formation massique de l'espèce k à la température $T_0 = 0$ K.

4.5.2 Dégagement de chaleur

Le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ dû aux réactions chimiques est calculé grâce à la formule :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{ns} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k \quad (4.40)$$

Deuxième partie

Simulations Numériques Directes
réalisées et lois de paroi développées,
en parois inertes

Le développement de lois de paroi doit permettre au futur code de dimensionnement de simuler les transferts de chaleur pariétaux avec une bonne précision, et à un coût modéré en utilisant une approche RANS haut-Reynolds. La loi logarithmique classique, très répandue dans les codes RANS haut-Reynolds, fournit des résultats raisonnablement bons pour des écoulements simples incompressibles. Actuellement, la tendance est à la généralisation de cette loi de paroi afin de prendre en compte plus de physique ([22], [23], [68]). Ces futures lois de paroi requièrent l'intégration des effets liés à de fortes variations de densité/température, à l'hétérogénéité du fluide et aux réactions hétérogènes. Il est primordial de se munir de données de référence car leur absence constitue un obstacle majeur au développement de tels modèles. Vu qu'il n'existe pas de données expérimentales pour les écoulements typiques de tuyère, plusieurs simulations numériques directes sont entreprises, afin de pallier l'absence de ces données. La base de données ainsi générée sera analysée en termes de lois de paroi.

Le chapitre 1 est consacrée aux différentes DNS effectuées avec de l'air, puis avec un mélange gazeux multi-espèce non réactif. A l'issue de ces DNS, une première loi de paroi couplée vitesse-température, et prenant en compte les variations du nombre de Prandtl moléculaire, est dérivée, et validée.

Le chapitre 2 s'intéresse quant à lui à la DNS avec mélange gazeux réactif. Une loi de paroi couplée vitesse-température, et intégrant la chimie, est alors proposée, et validée. De plus, cette loi, développée pour un écoulement subsonique, est étendue à des nombres de Mach élevés .

Ces DNS ont été réalisées avec le code de calcul AVBP développé au CERFACS³ principalement, et à l'IFP⁴. Ce code est déjà largement validé (*cf* la page internet http://www.cerfacs.fr/cfd/avbp_code.php). Une description sommaire de ce code est disponible à l'annexe A.

³Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique

⁴Institut Français du Pétrole

Chapitre 1

DNS d'écoulements turbulents en canal plan 3D avec parois inertes

Ce chapitre s'attache à décrire les premières DNS d'écoulements gazeux turbulents pleinement développés en canal plan tridimensionnel, avec parois inertes, qui ont été effectuées au cours de cette thèse, ainsi qu'à présenter leurs résultats et les analyser en termes de lois de paroi.

Dans un premier temps le fluide est de l'air, qui s'écoule en régime turbulent pleinement développé dans un canal quasi isotherme (*i.e.* $T_w = T_{\text{gaz}}$). Ce cas est utile à la validation de l'outil numérique et de la procédure de post-traitement, car de nombreuses données expérimentales et numériques sont disponibles pour ce type d'écoulement. Puis le canal est pris anisotherme (avec $T_w < T_{\text{gaz}}$) et toujours avec de l'air. Enfin, dans le cas anisotherme, le gaz n'est plus de l'air, mais un mélange composé de sept espèces gazeuses qui ne réagissent pas entre-elles.

1.1 Configuration des DNS

Le domaine de calcul et le système de coordonnées sont représentés à la figure 1.1.

Les murs supérieur et inférieur sont traités par une condition aux limites de mur isotherme non glissant, tandis qu'une condition de périodicité est appliquée dans les directions longitudinale et transverse.

Le coût numérique d'une DNS de canal est directement lié au nombre de Reynolds de frottement Re_τ , défini par $Re_\tau = (u_\tau h)/\nu$, avec u_τ vitesse de frottement, h demi-hauteur du canal et ν viscosité cinématique. Le nombre de Reynolds de frottement doit être choisi le plus petit possible, mais assez grand pour permettre l'établissement d'un écoulement turbulent. La valeur $Re_\tau = 180$, classiquement utilisée dans la littérature, a été choisie pour ces trois DNS. Cela correspond à un nombre de Reynolds basé sur la vitesse axiale moyenne et sur la demi-hauteur du canal d'environ 3400.

Le maillage parallélépipédique du canal comporte $17 \times 130 \times 33$ nœuds. La résolution uniforme du maillage suivant les directions x et z (tableau 1.1) permet de capturer la struc-

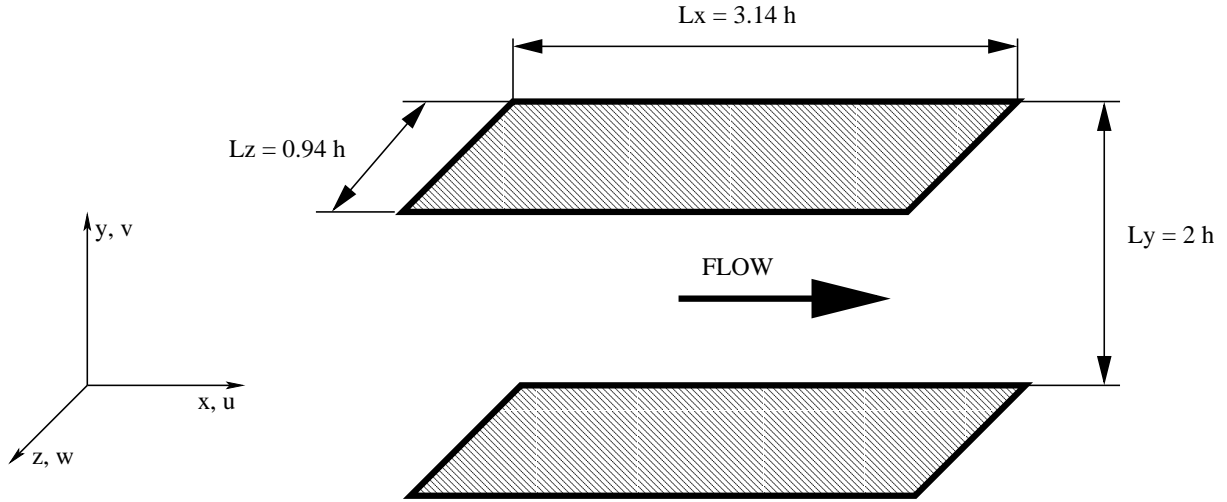


Fig. 1.1: Géométrie du domaine de calcul et système de coordonnées

ture allongée de la turbulence. Afin d'être en mesure de résoudre la sous-couche visqueuse, le maillage suit une loi de raffinement en tangente hyperbolique dans la direction y normale à l'écoulement. La distribution des nœuds dans cette direction est donnée par

$$y_j = \left(1 - \frac{\tanh\left(ah\left(1 - \frac{j-1}{ny-1}\right)\right)}{\tanh(ah)} \right) h \quad (1.1)$$

où ny est le nombre de nœuds de maillage dans la direction y , h la demi-hauteur du canal, et a un paramètre d'étirement. Dans les DNS réalisées, a est égal à 1.45 et ny à 130.

On travaille avec un canal de petites dimensions afin de réduire le temps de calcul, mais suffisamment grand pour qu'un écoulement turbulent puisse s'y développer. On est au-dessus du régime de canal minimal [43]. En termes d'unités de paroi, le domaine de calcul est caractérisé par les valeurs répertoriées dans le tableau 1.1.

Dimensions du canal en mètres	$L_x = \pi h$	$L_y = 2h$	$L_z = 0.3\pi h$
Dimensions du canal en unités de paroi	$L_x^+ \simeq 565$	$L_y^+ \simeq 360$	$L_z^+ \simeq 169$
Nombre de nœuds	$nx = 17$	$ny = 130$	$nz = 33$
Résolution du maillage	$\Delta x^+ \simeq 35$	$\Delta y^+ \simeq 0.9$ au mur $\Delta y^+ \simeq 5$ près de l'axe	$\Delta z^+ \simeq 5$

Tab. 1.1: Domaine de calcul ([70])

Dans ces trois DNS, on résout les équations de Navier-Stokes tridimensionnelles compressibles, non stationnaires, avec termes sources constants en espace.

Un terme source, noté S_{qdm} , est ajouté à la composante longitudinale de l'équation de conservation de la quantité de mouvement en raison de la périodicité dans la direction longitudinale. Ce terme source agit comme un gradient de pression et permet au fluide de s'écouler dans le canal malgré les forces de frottement pariétales qui tendent à l'immobiliser. Afin de rester consistant, la quantité $S_{\text{qdm}} \times u$ doit être rajoutée à l'équation de conservation de l'énergie totale. Le terme source S_{qdm} se calcule par la relation

$$S_{\text{qdm}} = \tau_w / h . \quad (1.2)$$

La relation (1.2) découle de l'intégration suivant y de la composante longitudinale de l'équation de conservation de la quantité de mouvement relative à l'écoulement étudié. La corrélation de Dean [25] pour un canal pleinement développé permet d'évaluer le frottement à la paroi τ_w et s'écrit

$$\tau_w = 3.02 \times 10^{-3} \rho u_c^2 \quad (1.3)$$

où u_c désigne la vitesse moyenne au centre du canal.

1.1.1 Canal quasi isotherme avec de l'air

Le tableau 1.2 regroupe quelques données représentatives de la configuration de la DNS de canal quasi isotherme contenant de l'air.

P (MPa)	T _w (K)	h (mm)	Ma _{max}	Re _τ
10	2700	0.101	0.2	180

Tab. 1.2: Données relatives à la configuration de la DNS de canal quasi isotherme contenant de l'air

Cette DNS est destinée à préparer les DNS ultérieures (*i.e.* chapitre 2 de la partie II et partie III) qui seront représentatives d'un écoulement dans le convergent d'une tuyère de propulsion d'un moteur-fusée à propergol solide (écoulement turbulent, multi-espèce, réactif, qui ablate les parois en carbone de la tuyère). Un tel écoulement étant largement subsonique, on choisit de travailler avec un nombre de Mach égal à 0.2 : cela permet d'éliminer les effets de compressibilité, et d'avoir un pas de temps pas trop petit.

La connaissance de la pression, de la température de paroi T_w , du nombre de Mach Ma ainsi que du nombre de Reynolds de frottement Re_τ permettent de calculer la demi-hauteur h du canal, et donc de dimensionner le canal. Les étapes *i*), *ii*) et *iii*) ci-dessous décrivent le dimensionnement du canal.

i) Détermination de la vitesse moyenne au centre du canal u_c :

Notons c la célérité du son, γ le coefficient isentropique et r le rapport de la constante universelle des gaz parfaits R à la masse molaire de notre mélange gazeux ($\gamma = 7/5$ et $R = 8.314 \text{ J}/(\text{mol.K})$).

D'après les relations

$$c = \sqrt{\gamma r T} \quad (1.4)$$

et

$$u_c = c \times Ma_c \quad (1.5)$$

on trouve que la vitesse axiale u_c vaut environ 210 m/s.

ii) Détermination de la vitesse de frottement u_τ :

La vitesse de frottement u_τ est définie par :

$$u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho_w}} \quad (1.6)$$

La corrélation de Dean pour un canal pleinement développé permet d'évaluer le frottement à la paroi τ_w .

On trouve ainsi : $u_\tau \simeq 11.5$ m/s.

La vitesse de frottement u_τ peut aussi se calculer grâce à la loi de paroi logarithmique

$$u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + 5.5 \quad (1.7)$$

car dans la sous-couche inertielle (*i.e.* $y^+ > 50$), le profil de vitesse obéit à cette loi. κ désigne la constante de von Kàrmàn ($\kappa = 0.4$). Sachant que $h^+ = Re_\tau$, on déduit u_τ de la formule $u_{max}^+ = 1/\kappa \ln(h^+) + 5.5 = u_{max}/u_\tau$.

iii) Détermination de la demi-hauteur h du canal :

La viscosité cinématique ν étant connue (c'est celle de l'air à 2700 K), la définition de Re_τ fournit h , qui vaut environ 1.01×10^{-4} m.

Dans cette DNS, le terme source S_{qdm} vaut environ 1.7×10^7 Pa/m car $u_\tau \simeq 11.5$ m/s et $\rho_w \simeq 13.02$ kg/m³.

Il existe deux façons d'initialiser le calcul :

- soit on superpose un champ aléatoire u' à un profil parabolique laminaire pour la vitesse longitudinale ;
- soit on part d'une solution déjà turbulente, et on évite ainsi la longue phase de transition du régime laminaire vers le régime turbulent.

C'est la seconde option qui est retenue. La solution turbulente est obtenue grâce à un code de calcul dédié aux DNS de canaux incompressibles [71], puis elle est convertie en une solution au format lisible par AVBP¹.

1.1.2 Canal anisotherme avec de l'air

La DNS présentée maintenant est représentative des conditions thermodynamiques au niveau du convergent de la tuyère. A cet endroit, il règne une pression de 10 MPa et les

¹AVBP est un code dans lequel les variables thermodynamiques sont stockées au sommet des cellules, tandis que dans le code utilisé pour générer le champ initial elles sont stockées au centre des cellules.

parois, dont la température s'élève à 2700 K, sont en contact avec un mélange gazeux d'environ 3400 K. L'écoulement est largement subsonique. On utilise un nombre de Mach de l'ordre de 0.2 : cela permet d'éliminer les effets de compressibilité et de travailler avec un pas de temps pas trop petit.

Pour cette DNS, il est nécessaire d'ajouter un terme source, noté S_e , à l'équation de conservation de l'énergie totale de manière à maintenir le fluide à une température cible T_{cible} (ici $T_{\text{cible}} = 3400$ K). Ce terme source S_e chauffe le fluide en volume et s'exprime par la relation

$$S_e = \rho C_v \times \frac{T_{\text{cible}} - \langle T \rangle}{\tau_{S_e}} \quad (1.8)$$

où C_v désigne la capacité calorifique à volume constant, où $\langle \rangle$ est l'opérateur de moyenne volumique et où τ_{S_e} a la dimension d'un temps et peut être vu comme un temps de relaxation. Dans ce calcul, la valeur donnée à τ_{S_e} représente 50% du temps de diffusion turbulente h/u_τ .

Le terme source S_e a été construit de manière à être constant lorsqu'on écrit l'équation de conservation de l'énergie totale avec la température. Pour un problème de diffusion pure, S_e ne change donc pas les profils de température, car il est constant en espace. Notre problème étant essentiellement diffusif, S_e ne devrait pas trop influencer les profils de température. Par contre, ceux-ci seraient modifiés si S_e n'était pas uniforme en espace.

Notons qu'en intégrant sur le volume du canal l'équation de conservation de l'énergie totale, puis en la moyennant temporellement, on aboutit à

$$h \langle S_e \rangle_t = q_w \quad (1.9)$$

où $\langle \rangle_t$ désigne l'opérateur de moyennes temporelle et volumique, et q_w le flux de chaleur pariétal.

La solution initiale pour cette DNS est une solution turbulente ayant atteint un état convergé de la DNS de canal quasi isotherme.

1.1.3 Canal anisotherme avec mélange gazeux multi-espèce non réactif

Le mélange gazeux utilisé est le mélange équivalent défini à l'annexe B. Cependant, à ce stade de l'étude, on n'introduit pas de schéma cinétique. On travaille donc avec un mélange équivalent non réactif.

L'initialisation de la DNS avec mélange équivalent non réactif se fait avec une solution issue de la DNS du canal anisotherme contenant de l'air. A partir d'un champ instantané de la température, le champ de fraction massique de chaque espèce est généré par interpolation des courbes d'équilibre du mélange équivalent (*cf* tableau B.6 de l'annexe B). D'autre part, les propriétés thermodynamiques de chaque espèce du mélange équivalent, ainsi que du mélange lui-même (conductivité thermique λ et viscosité dynamique μ), sont calculées grâce à la bibliothèque de programmes EGLIB [28]. Les coefficients $D_{i,mix}$ de diffusion dans

le mélange de chaque espèce i sont calculés pour de la diffusion 1D pure. Etant donné que le nombre de Schmidt Sc_i de l'espèce i est donné par la formule

$$Sc_i = \frac{\nu}{D_{i,mix}} \quad (1.10)$$

on travaillera avec un nombre de Schmidt par espèce. Les Sc_i sont recensés dans le tableau 1.3.

Espèce i	H ₂	N ₂	CO	H ₂ O	H	CO ₂	OH
Sc _{i}	0.20	0.87	0.86	0.65	0.15	0.98	0.53

Tab. 1.3: Nombre de Schmidt Sc_i de chaque espèce i pour $P = 10$ MPa

Le nombre de Prandtl Pr du mélange est fourni par EGLIB et il vaut 0.47. Pour des températures comprises entre 2700 K et 3400 K, les Sc_i et Pr sont des nombres constants à 1 ou 2% près, par rapport à la température. La simulation numérique est donc tout à fait raisonnable en terme de mélange.

1.2 DNS de canal quasi isotherme avec de l'air

1.2.1 Turbulence de canal

L'analyse des évolutions temporelles de la vitesse et de la température, ainsi que la visualisation de champs instantanés de vitesse et de température, permettent de s'assurer que le code de calcul simule correctement l'écoulement de canal plan tridimensionnel.

L'évolution temporelle de la température moyenne dans le canal est illustrée à la figure 1.2, celle des vitesses instantanées longitudinale et normale prises en un point situé au milieu de l'axe du canal aux figures 1.3 et 1.4 respectivement.

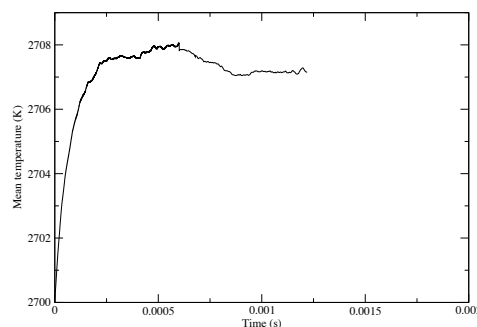


Fig. 1.2: Evolution temporelle de la température moyenne pour le canal quasi isotherme

Au temps $t = 0$, la température moyenne est égale à 2700 K. Puis le frottement du fluide sur les parois génère de la chaleur : une partie de l'énergie cinétique est dégradée en énergie interne et la température moyenne augmente (c'est l'effet Joule). Enfin, un équilibre thermique s'installe lorsque la génération de chaleur liée aux frottements pariétaux est compensée par les pertes thermiques sur les parois isothermes. La température moyenne atteint alors un plateau, mais fluctue autour de celui-ci à cause de la turbulence.

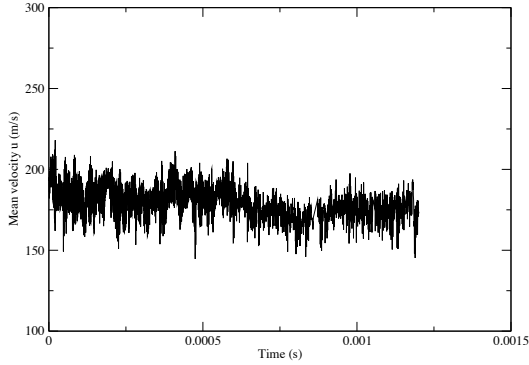


Fig. 1.3: Evolution temporelle de la vitesse u en un point au centre du canal quasi isotherme

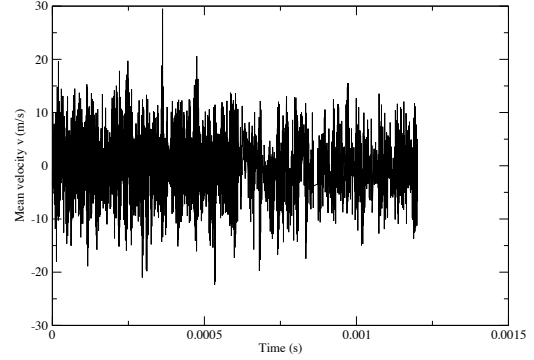


Fig. 1.4: Evolution temporelle de la vitesse v en un point au centre du canal quasi isotherme

Grâce à la solution initiale choisie (solution turbulente), aucune phase de transition vers la turbulence n'est observée pour u et v au centre du canal (il en est de même pour w). On note de fortes fluctuations de l'ordre de 15 m/s, ce qui correspond à une intensité de turbulence u'/u_c de l'ordre de 7.5%.

Les calculs d'écoulements turbulents dans des canaux ont montré l'existence de structures cohérentes allongées dans la direction principale de l'écoulement. Ces structures sont associées à de la vorticit  dans la direction longitudinale, alternativement positive et n gative. Leur espacement moyen dans la direction transversale et parall le   la paroi est de l'ordre de la centaine d'unit s de paroi. Ces zones de vorticit  longitudinale alternativement positive et n gative induisent au proche voisinage des parois des raies ("streaks") caract ris es par des vitesses alternativement  lev es puis mod r es dans la direction longitudinale. On visualise ces "streaks" sur la figure 1.5, o  sont repr sent s les isocontours de vitesse longitudinale instantan e sur les plans (x, y)   $z = z_{min}$ et (y, z)   $x = x_{max}$, ainsi que le tenseur de cisaillement aux murs sup rieur et inf rieur.

L gende de la figure 1.5 :

Pour chacune des deux parois, le frottement pari tal τ_w est calcul  par la formule $\tau_w = \mu_w \frac{\partial u}{\partial x_n}$ o  n d signe la normale ext rieure   la paroi. Ainsi, τ_w   la paroi inf rieure a le m me signe que celui   la paroi sup rieure.

- Pour le mur sup rieur : $-2750 \leq \tau_w \leq -1000$ Pa du gris fonc  vers le clair
- Pour le mur inf rieur : $-2000 \leq \tau_w \leq -700$ Pa du gris fonc  vers le clair



Fig. 1.5: Tenseurs de cisaillement au mur et isocontours de vitesse longitudinale pour le canal quasi isotherme

- Pour les isocontours : $0 \leq u \leq 190$ m/s du gris foncé vers le clair

Le flux de chaleur pariétal q_w et les isocontours de température instantanée sur les plans (x, y) à $z = z_{min}$ et (y, z) à $x = x_{max}$ sont représentés à la figure 1.6.

Légende de la figure 1.6 :

Pour chacune des deux parois, le flux de chaleur pariétal q_w est calculé par la formule $q_w = -\lambda_w \frac{\partial T}{\partial x_n}$ où n désigne la normale extérieure à la paroi. Ainsi, q_w à la paroi inférieure a le même signe que celui à la paroi supérieure.

- Pour le mur supérieur : $7.5 \times 10^4 \leq q_w \leq 3.5 \times 10^5$ W/m² du gris foncé vers le clair
- Pour le mur inférieur : $7.5 \times 10^4 \leq q_w \leq 2.6 \times 10^5$ W/m² du gris foncé vers le clair
- Pour les isocontours : $2700 \leq T \leq 2708$ K du gris clair vers le foncé

On constate, sur les figures 1.5 et 1.6, que la température, resp. le flux de chaleur pariétal, présente la même structure que la vitesse longitudinale u , resp. le frottement pariétal. Cela est cohérent avec le fait que u' et T' sont très bien corrélées en turbulence pariétale.

Les figures 1.7, 1.8, 1.9 et 1.10 montrent respectivement les isocontours des composantes instantanées u , v , w du champ de vitesse et de la température instantanée dans le plan

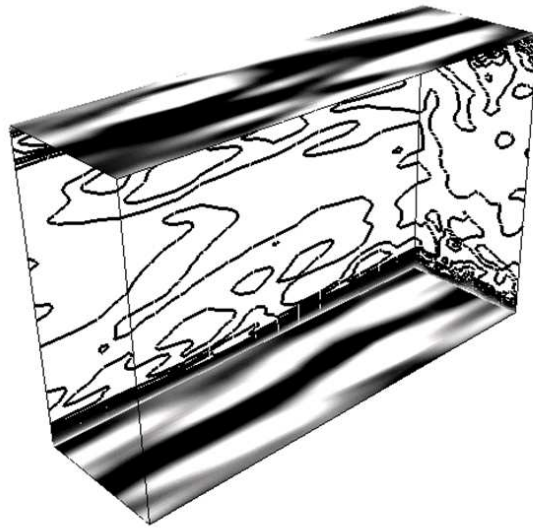


Fig. 1.6: Flux de chaleur pariétal et isocontours de température pour le canal quasi isotherme

(y, z) à $x = L_x/2$.

Légende des figures 1.7, 1.8, 1.9 et 1.10 :

- Isocontours de u dans le plan (y, z) : $0 \leq u \leq 190$ m/s du gris foncé vers le clair
- Isocontours de v dans le plan (y, z) : $-30 \leq v \leq 12$ m/s du gris foncé vers le clair
- Isocontours de w dans le plan (y, z) : $-34 \leq w \leq 10$ m/s du gris foncé vers le clair
- Isocontours de T dans le plan (y, z) : $2700 \leq T \leq 2709$ K du gris foncé vers le clair



Fig. 1.7: Isocontours instantanés de u dans un plan (y, z)



Fig. 1.8: Isocontours instantanés de v dans un plan (y, z)



Fig. 1.9: Isocontours instantanés de w dans un plan (y, z)

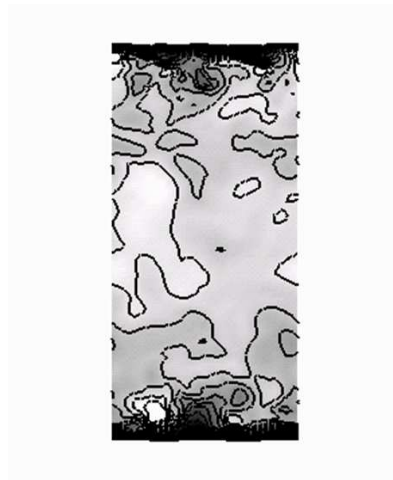


Fig. 1.10: Isocontours dans un plan (y, z) à $x = L_x/2$ du champ de température instantanée pour le canal quasi isotherme

1.2.2 Statistiques

Lorsqu'on arrive à un état statistiquement convergé, c'est-à-dire lorsque les évolutions temporelles des variables de l'écoulement ont atteint un plateau, des moyennes temporelles sont effectuées pendant un temps physique représentatif des phénomènes turbulents mis en jeu. Ici, c'est le temps de diffusion turbulente, noté τ_{D_t} , qui est important. Ce temps est caractéristique de l'effet de la turbulence sur la demi-hauteur h du canal et il s'exprime par le rapport h/u_τ . Les moyennes temporelles sont ainsi réalisées sur plusieurs temps de diffusion turbulente (26 ici). Elles sont ensuite complétées par des moyennes spatiales suivant les directions homogènes de l'écoulement que sont les directions longitudinale et transverse. Au final, on récupère des quantités statistiques qui ne dépendent plus que de y .

Le nombre de Mach moyen dans la direction de l'écoulement ($Ma = 0.2$), ainsi que les variations de température, sont faibles. La moyenne de Favre peut ainsi être remplacée par la classique moyenne de Reynolds.

La DNS ayant été effectuée à $Re_\tau = 180$, ses statistiques vont pouvoir être confrontées à celles de la DNS de *Kim, Moin & Moser* [54].

Les figures 1.11 et 1.12 montrent les profils de densité et de température moyennes.

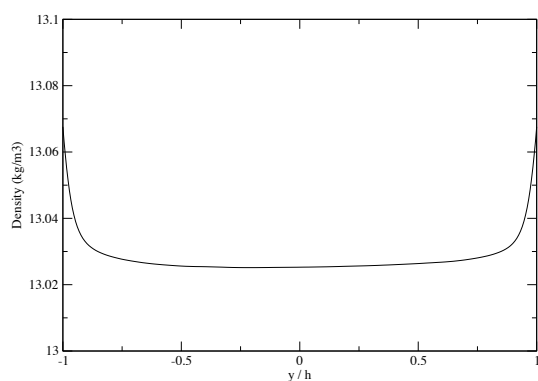


Fig. 1.11: Profil de densité moyenne pour le canal quasi isotherme

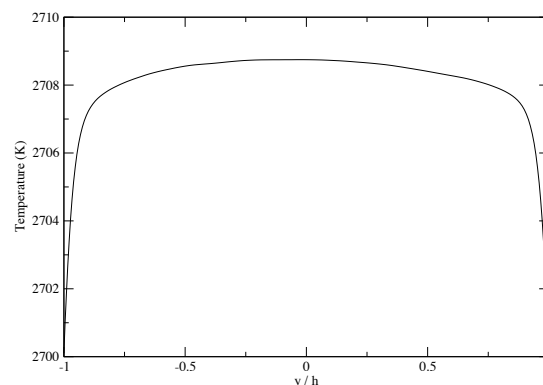


Fig. 1.12: Profil de température moyenne pour le canal quasi isotherme

La conversion de l'énergie cinétique en énergie interne provoque une augmentation de la température moyenne T_c sur l'axe du canal car les parois sont isothermes. Le rapport T_c/T_w vaut environ 1.003.

Un écoulement de canal pleinement développé est quasi isobare dans la direction normale au mur. Par conséquent, le rapport de la densité moyenne au mur ρ_w à la densité moyenne axiale ρ_c doit avoir la même valeur que T_c/T_w . C'est le cas car ρ_w/ρ_c vaut environ 1.003.

La figure 1.13 montre que le profil de la composante longitudinale u du champ de vitesse moyenne, est symétrique par rapport à la droite $y/h = 0$, ce qui est en accord avec l'écoulement étudié.

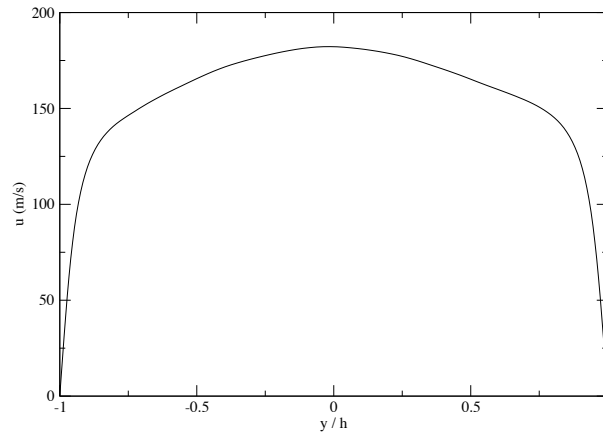


Fig. 1.13: Profil de u moyen pour le canal quasi isotherme

La figure 1.14 compare le profil obtenu pour u^+ aux lois de paroi classiques que sont la loi linéaire et la loi logarithmique ([102]). Comme l'on s'y attendait, les résultats font apparaître :

- une partie linéaire, où $u^+ = y^+$;
- une partie logarithmique, où $u^+ = (1/\kappa) \ln(y^+) + 5.5$ avec κ constante de von Kàrmàn ($\kappa = 0.4$) ;
- une zone de transition entre les parties linéaire et logarithmique.

La partie linéaire est visible sur plusieurs points et jusqu'à $y^+ \simeq 8$.

La partie logarithmique du profil commence vers $y^+ = 25$ et elle a la bonne pente, ce qui signifie que les statistiques obtenues correspondent bien à la valeur $\kappa = 0.4$. Par contre, nos valeurs de u^+ sont un peu faibles par rapport à la loi logarithmique basée sur une constante additive égale à 5.5 (valeur généralement admise pour des Re_τ de 180), tandis qu'elles sont en bon accord avec une loi logarithmique ayant une constante additive égale à 5. Ceci est certainement à mettre en rapport avec la petitesse du domaine simulé. On sait en effet que les canaux de petites dimensions conduisent à des statistiques très précises uniquement dans la zone pariétale. L'accord entre nos données et la loi logarithmique est toutefois raisonnable et les écarts observés ne peuvent pas remettre en cause la capacité des simulations à reproduire la physique des écoulements pariétaux.

Comparons à présent nos vitesses RMS à celles obtenues dans la DNS de *Kim, Moin & Moser* [54] (figure 1.15).

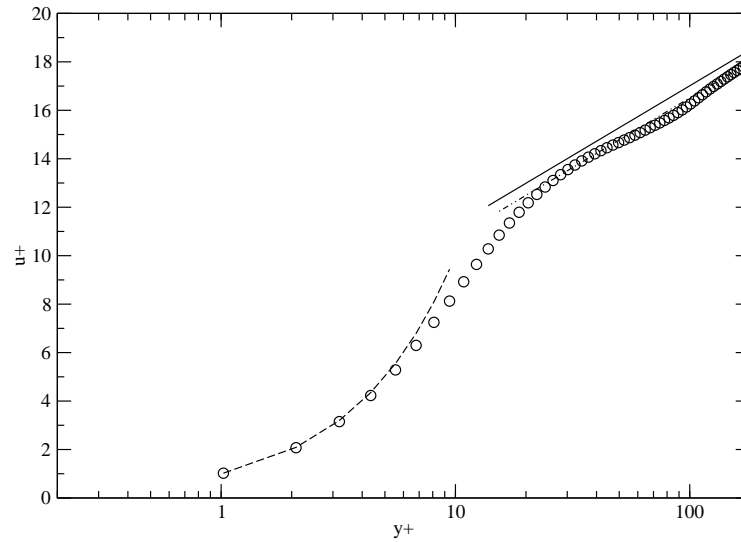


Fig. 1.14: Profil de vitesse longitudinale moyenne et loi de paroi universelle pour le canal quasi isotherme. \circ : AVBP ; — : Loi logarithmique $u^+ = 2.5 \ln(y^+) + 5.5$; - . - . : Loi logarithmique $u^+ = 2.5 \ln(y^+) + 5$; - - - : Loi linéaire $u^+ = y^+$

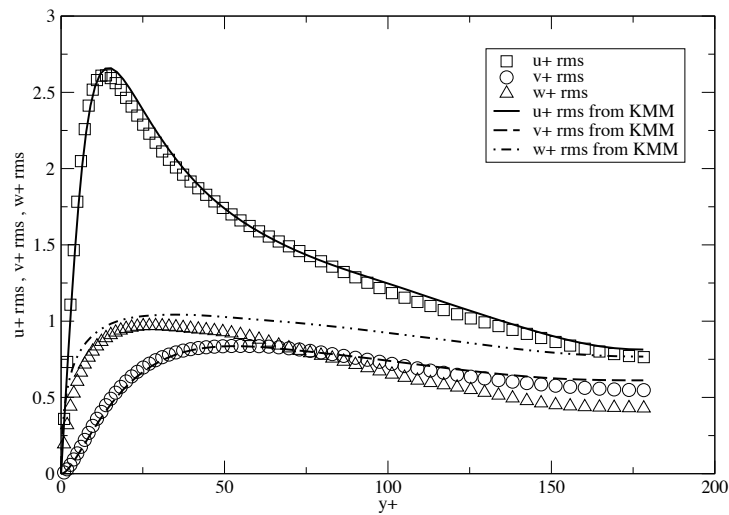


Fig. 1.15: Fluctuations de vitesses RMS normées par la vitesse de frottement à la paroi, pour le canal quasi isotherme

Nos résultats sont excellents dans la zone de proche paroi ($y^+ < 40$). Ils sont très représentatifs des données de références de *Kim, Moin & Moser* : en effet, les valeurs des maxima de u_{RMS}^+ , v_{RMS}^+ et w_{RMS}^+ sont correctes, ainsi que la position de ces maxima. Cela signifie que l'anisotropie de la turbulence de paroi est très bien représentée :

- au voisinage du mur, la répartition de l'énergie est anisotrope et la fluctuation de vitesse longitudinale atteint sa valeur maximale pour $y^+ \simeq 12$ (et pour $y^+ \simeq 15$ dans les données de *Kim, Moin & Moser*) ;
- plus on se rapproche de l'axe du canal, plus l'anisotropie diminue.

Dans la partie centrale du canal, les résultats sont assez loin des données de *Kim, Moin & Moser* (notamment pour w_{RMS}^+) : c'est classique du canal minimal et c'est dû à son étroitesse ([43], [65]). Notons cependant que les contraintes de Reynolds sont faibles dans cette zone et qu'une mauvaise estimation de ces quantités n'a que peu d'influence sur le bilan de quantité de mouvement.

1.3 DNS de canal anisotherme avec de l'air

1.3.1 Turbulence de canal

L'évolution temporelle de la température moyenne dans le canal est illustrée à la figure 1.16, celle des vitesses instantanées longitudinale et normale prises en un point situé au milieu de l'axe du canal aux figures 1.17 et 1.18 respectivement.

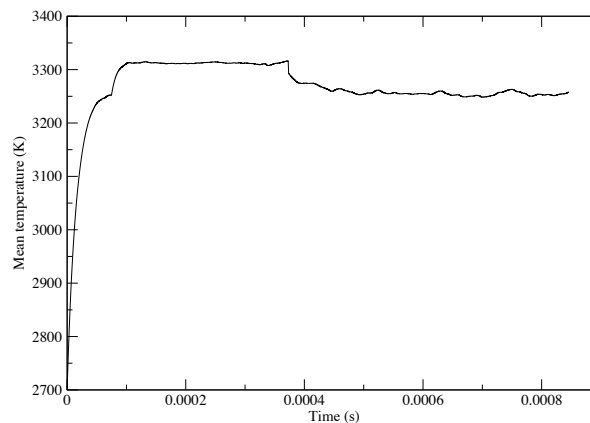


Fig. 1.16: Evolution temporelle de la température moyenne pour le canal anisotherme

Au temps $t = 0$, la température moyenne est égale à 2700 K. Puis le terme source S_e destiné à chauffer le fluide entre en action et la température augmente fortement. L'échauffement provoqué par S_e s'ajoute à l'effet Joule. Comme dans le cas du canal quasi isotherme, la température moyenne atteint un plateau (autour duquel elle oscille à cause de la turbulence) lorsque les pertes thermiques sur les parois isothermes contrebalancent la génération de chaleur liée aux frottements pariétaux et au terme source S_e .

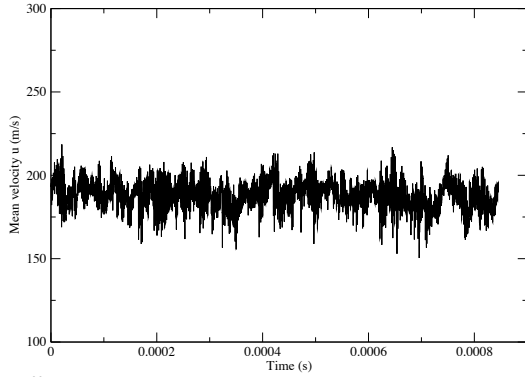


Fig. 1.17: Evolution temporelle de la vitesse u en un point au centre du canal anisotherme

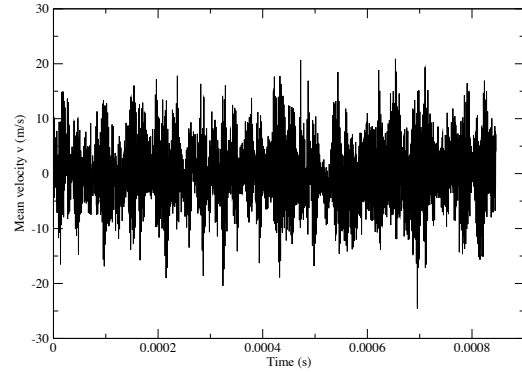


Fig. 1.18: Evolution temporelle de la vitesse v en un point au centre du canal anisotherme

On note de fortes fluctuations de l'ordre de 10 m/s, ce qui correspond à une intensité de turbulence u'/u_c de l'ordre de 5%.

Les isocontours de vitesse longitudinale instantanée sur les plans (x, y) à $z = z_{min}$ et (y, z) à $x = x_{max}$, ainsi que le tenseur de cisaillement aux murs supérieur et inférieur, sont représentés à la figure 1.19.

Légende de la figure 1.19 :

- Pour le mur supérieur : $-3000 \leq \tau_w \leq 0$ Pa du gris foncé vers le clair
- Pour le mur inférieur : $-3000 \leq \tau_w \leq 0$ Pa du gris foncé vers le clair
- Pour les isocontours : $-1.6 \times 10^{-18} \leq u \leq 217$ m/s du gris foncé vers le clair

A nouveau, nous retrouvons dans la figure 1.19 les “streaks”, structures essentielles de la turbulence de proche paroi.

Le flux de chaleur pariétal q_w et les isocontours de température instantanée sur les plans (x, y) à $z = z_{min}$ et (y, z) à $x = x_{max}$ sont représentés à la figure 1.20.

Légende de la figure 1.20 :

- Pour le mur supérieur : $7.3 \times 10^6 \leq q_w \leq 1.5 \times 10^7$ W/m² du gris foncé vers le clair
- Pour le mur inférieur : $4.3 \times 10^6 \leq q_w \leq 1.3 \times 10^7$ W/m² du gris foncé vers le clair
- Pour les isocontours : $3000 \leq T \leq 3380$ K du gris foncé vers le clair

Là encore, les figures 1.19 et 1.20 illustrent bien la forte corrélation qui existe entre les champs de vitesse longitudinale et de température, en turbulence pariétale.

Les figures 1.21, 1.22, 1.23 et 1.24 montrent respectivement les isocontours des composantes instantanées u , v , w du champ de vitesse et de la température instantanée dans le plan (y, z) à $x = L_x/2$.

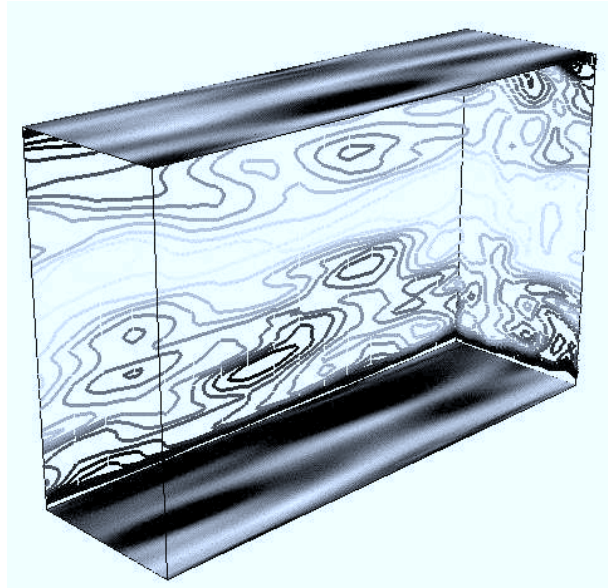


Fig. 1.19: Tenseurs de cisaillement au mur et isocontours de vitesse longitudinale pour le canal anisotherme

Légende des figures 1.21, 1.22, 1.23 et 1.24 :

- Isocontours de u dans le plan (y, z) : $0 \leq u \leq 207$ m/s du gris foncé vers le clair
- Isocontours de v dans le plan (y, z) : $-28 \leq v \leq 12$ m/s du gris foncé vers le clair
- Isocontours de w dans le plan (y, z) : $-36 \leq w \leq 12$ m/s du gris foncé vers le clair
- Isocontours de T dans le plan (y, z) : $2700 \leq T \leq 3380$ K du gris foncé vers le clair

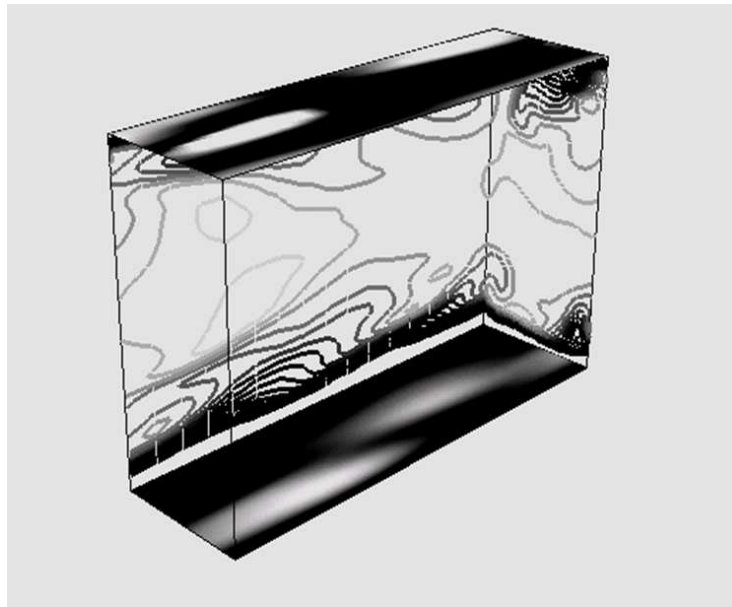


Fig. 1.20: Flux de chaleur pariétal et isocontours de température pour le canal anisotherme

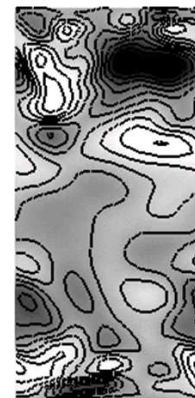
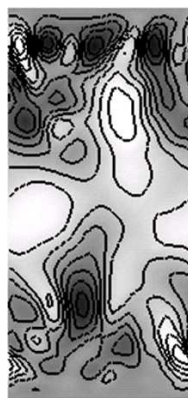


Fig. 1.21: Isocontours instantanés de u dans un plan (y, z) **Fig. 1.22:** Isocontours instantanés de v dans un plan (y, z) **Fig. 1.23:** Isocontours instantanés de w dans un plan (y, z)



Fig. 1.24: Isocontours dans un plan (y, z) à $x = L_x/2$ du champ de température instantanée pour le canal anisotherme

1.3.2 Statistiques

Les moyennes présentées ici ont été accumulées pendant 33 temps de diffusion turbulente.

La figure 1.25 compare les moyennes de Reynolds et de Favre de la vitesse longitudinale u . Ces deux moyennes se superposent, ce qui nous permet de travailler avec la moyenne de Reynolds. On constate, grâce aux figures 1.26 et 1.27, que les profils de densité et de

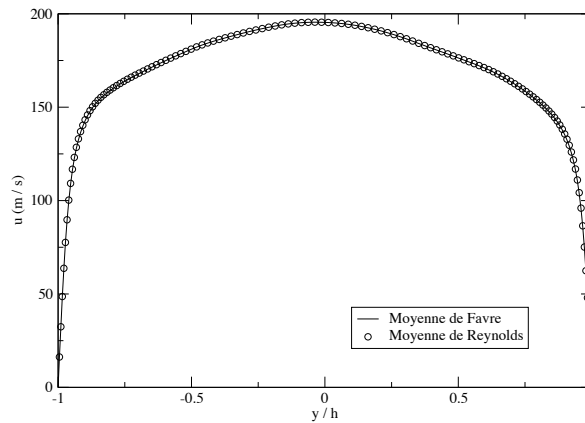


Fig. 1.25: Profils de \bar{u} et \tilde{u} pour le canal anisotherme

température moyennes correspondent bien à un écoulement quasi isobare dans la direction normale au mur et que, vu la symétrie de ces quantités, l'échantillon statistique est suffisant.

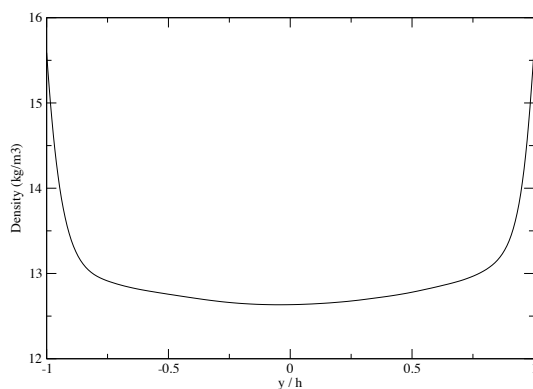


Fig. 1.26: Profil de densité moyenne pour le canal anisotherme

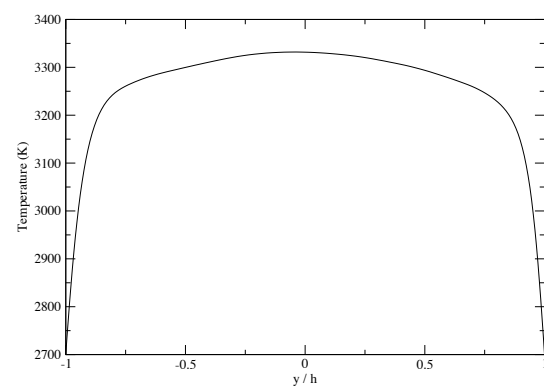


Fig. 1.27: Profil de température moyenne pour le canal anisotherme

La figure 1.28 montre les profils de \bar{u} , \bar{v} et \bar{w} , composantes respectivement longitudinale, normale et transverse du champ de vitesse moyenne.

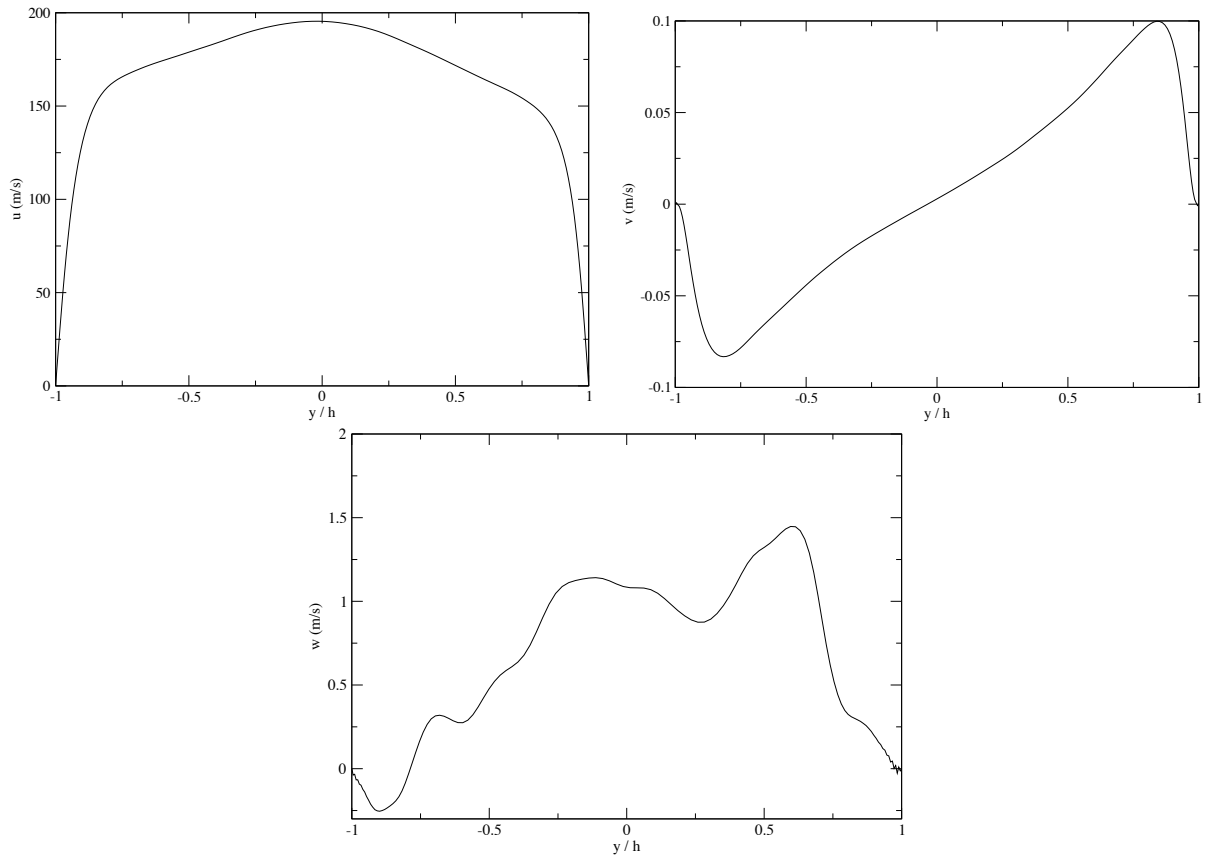


Fig. 1.28: Profils de \bar{u} , \bar{v} et \bar{w} pour le canal anisotherme

On retrouve à nouveau un profil symétrique pour \bar{u} . Le profil de \bar{v} est antisymétrique et celui de \bar{w} n'est pas identiquement nul (alors qu'il l'est en théorie).

Remarque :

L'équation de continuité moyennée relative à notre écoulement s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\rho v}}{\partial y} = 0. \quad (1.11)$$

Il résulte de la condition de non-glissement de la vitesse à la paroi que :

$$\bar{\rho v} = 0 \quad \forall y. \quad (1.12)$$

Cela n'implique pas $\bar{v} = 0$. En effet, en décomposant ρ et v en parties moyenne et fluctuante, la relation (1.12) équivaut à :

$$\bar{v} = -\frac{\overline{\rho'v'}}{\bar{\rho}} \quad \forall y. \quad (1.13)$$

En utilisant la moyenne de Favre \tilde{v} de v , la relation (1.12) équivaut à :

$$\tilde{v} = 0 \quad \forall y \quad (1.14)$$

car $\bar{\rho}$ n'est pas nul.

En résumé :

$$\bar{v} \neq 0 \quad \forall y \quad \text{et} \quad \tilde{v} = 0 \quad \forall y$$

Notons que cela est vraiment visible lorsque les fluctuations de densité sont importantes.

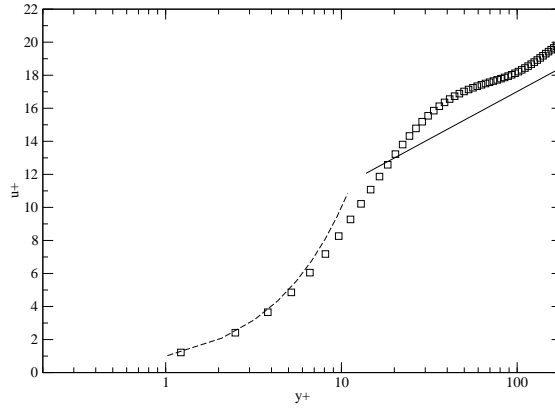


Fig. 1.29: Profil de vitesse longitudinale moyenne et loi de paroi universelle pour le canal anisotherme. \square : AVBP ; — : Loi logarithmique $u^+ = 2.5 \ln(y^+) + 5.5$; - - - : Loi linéaire : $u^+ = y^+$

Comme dans le cas du canal quasi isotherme, la figure 1.29 montre qu'on distingue trois zones pour le profil de u^+ :

- la zone linéaire, qui s'étend du mur jusqu'à $y^+ \simeq 10$ et où le profil de vitesse longitudinale obéit à $u^+ = y^+$;
- la zone logarithmique, qui débute vers $y^+ = 30$ et où $u^+ = (1/\kappa) \ln(y^+) + 5.5$, avec κ constante de von Kàrmàn ($\kappa = 0.4$) ;
- la zone de transition, qui fait le lien entre les parties linéaire et logarithmique.

Nos résultats sont proches de la loi logarithmique classique. Ceci n'est pas surprenant car le rapport de la température axiale à la température pariétale vaut environ 1.2, ce qui indique que l'on ne se trouve pas dans une situation fortement anisotherme.

La figure 1.30 montre, qu'entre le canal quasi isotherme et le canal anisotherme, la valeur maximale prise par chacune des composantes de la vitesse RMS change de quelques pourcents, ce qui est cohérent avec [71].

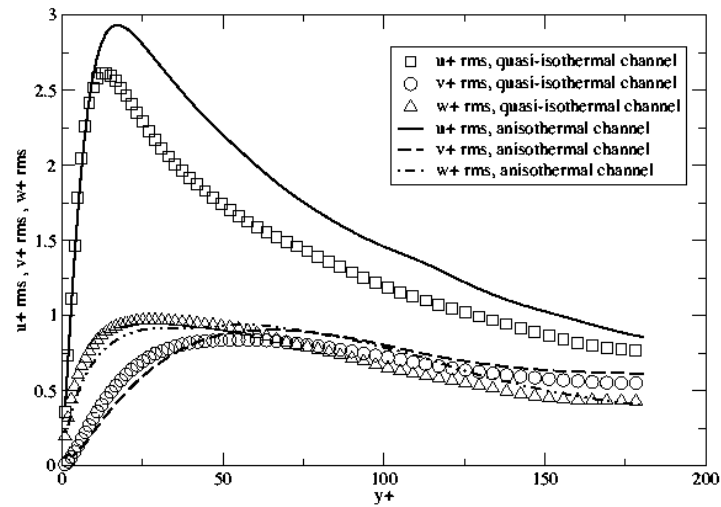


Fig. 1.30: Valeurs RMS des fluctuations de vitesse dans le canal quasi isotherme et le canal anisotherme

1.4 Apport de la DNS de canal anisotherme avec mélange multi-espèce inerte

Les DNS de canal contenant de l'air donnent des résultats "sains". Ceci était une condition nécessaire pour pouvoir se lancer dans des DNS de canal avec mélange multi-espèce non réactif et parois inertes, et exploiter les données générées par de telles DNS. Le but étant de simuler un écoulement dans le convergent d'une tuyère et d'en dériver une loi de paroi appropriée, une DNS de canal anisotherme en mélange multi-espèce inerte qui reproduit le gradient de température à cet endroit de la tuyère, a été réalisée. Dans ce cas, on a une température moyenne de l'ordre de 3000 K, au lieu des 3400 K de la première DNS avec mélange multi-espèce sans réaction chimique (*cf* section 1.1). La demi-hauteur du canal mesure alors 0.115 mm. Ce sont les résultats de cette DNS qui sont analysés dans cette section.

1.4.1 Processus d'homogénéisation

Dans la DNS de canal anisotherme avec mélange gazeux multi-espèce non réactif, le fluide évolue vers un état d'équilibre.

La figure 1.31 montre l'évolution temporelle des fractions massiques des espèces du mélange. Vu qu'il n'y a que des processus d'homogénéisation (pas de schéma cinétique), on se retrouve, en un temps fini, en situation de gaz homogène. On constate cependant que le temps nécessaire à l'homogénéisation du mélange gazeux multi-espèce (de l'ordre de 10^{-4} s) est comparable au temps chimique issu des tests effectués avec PSR (temps compris entre

1.4 Apport de la DNS de canal anisotherme avec mélange multi-espèce inertiel

10^{-4} s et 10^{-3} s) (*cf* annexe B). Il sera donc important d'avoir un schéma cinétique qui reproduit les changements de concentrations des espèces du mélange avec la bonne vitesse (nécessité de prendre en compte la présence de troisièmes corps dans les réactions chimiques).

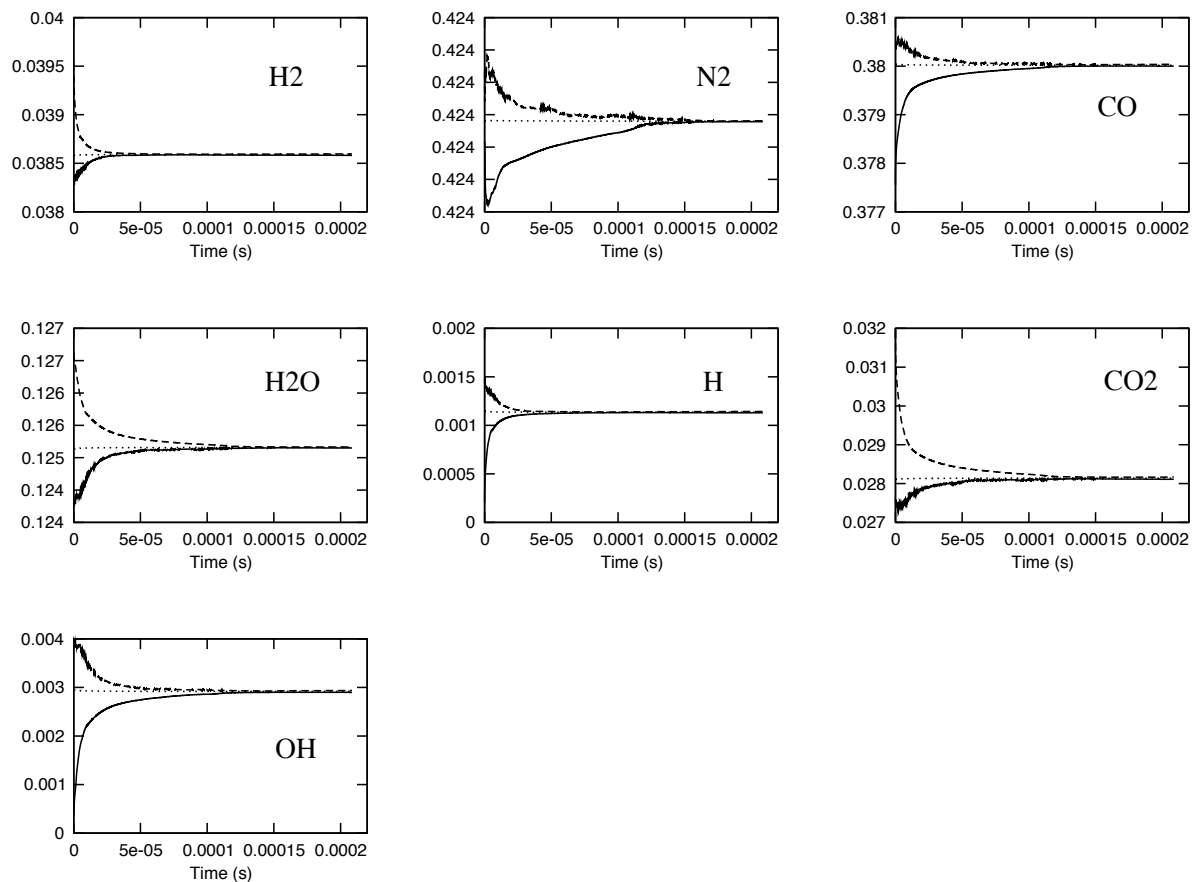


Fig. 1.31: Evolution temporelle des fractions massiques des sept espèces du mélange pour $P = 10$ MPa. $-\ -$: Fraction massique maximale; \dots : Fraction massique moyenne; — : Fraction massique minimale

Dans les sections 1.2 et 1.3, un traitement statistique a été effectué sur les données générées par les DNS de canaux quasi isotherme et anisotherme contenant de l'air, afin de s'assurer que ces DNS redonnent bien les résultats classiques de la turbulence de canal plan, en situations quasi incompressible quasi isotherme et quasi incompressible anisotherme. Dans le cas du canal anisotherme avec mélange gazeux multi-espèce non réactif, on aboutit, en un temps fini, à une situation de gaz homogène (composé de sept espèces, au lieu de deux dans le cas de l'air). On se retrouve alors dans une situation proche de celles étudiées dans les sections 1.2 et 1.3 dans le sens où le fluide considéré est homogène. La seule

différence notable concerne la valeur du nombre de Prandtl moléculaire, qui est de l'ordre de 0.7 pour l'air, et 0.47 pour notre mélange multi-espèce. Dans les sections à venir, on étudie les conséquences de cette différence en termes de loi de paroi.

1.4.2 Influence du nombre de Prandtl moléculaire

Afin de déterminer dans quelle mesure le nombre de Prandtl moléculaire influe sur le profil de température, une DNS en tout point identique à celle de canal anisotherme avec mélange gazeux multi-espèce inerte et parois inertes (*cf* sous-section 1.1.3), mais à $Pr = 1$ au lieu de $Pr = 0.47$ est effectuée. C'est l'une des grandes forces de la DNS que de pouvoir isoler un paramètre de l'écoulement et le faire varier à volonté.

Les figures 1.32 et 1.33 mettent en évidence l'influence du nombre de Prandtl sur le profil de température adimensionnée T^+ . Comme pour le profil de vitesse, une zone linéaire, une zone logarithmique et une zone de transition apparaissent.

Dans la zone linéaire, le profil de température suit la loi linéaire ([49])

$$T^+ = Pr y^+ \quad (1.15)$$

tandis que dans la zone logarithmique, il suit la loi logarithmique ([49])

$$T^+ = (Pr_t/\kappa) \ln(y^+) + 3.9 \quad (1.16)$$

On constate que :

- le nombre de Prandtl moléculaire a un effet non négligeable, qui n'est reproduit ni par la loi logarithmique classique, ni par la loi LMF, car ces deux lois de paroi ont été écrites en supposant $Pr = 1$;
- seule la corrélation de Kader [45] (définie dans la sous-section 1.4.3) reflète les résultats des DNS, indépendamment de la valeur du nombre de Prandtl moléculaire ;
- cependant, dans la zone logarithmique, la corrélation de Kader ne reproduit pas la pente du profil de T^+ issu de la DNS ; cela signifie que, dans le cadre d'une approche RANS haut-Reynolds, cette loi donnera de plus ou moins bons résultats suivant la valeur de l'altitude y^+ du premier nœud intérieur au maillage.

1.4.3 Loi de paroi

Sans schéma cinétique, on aboutit, en un temps fini, à un mélange homogène. D'autre part, la capacité thermique massique C_p du mélange ne change pas de manière importante dans la zone de proche paroi car le gradient de température est modéré et la composition du mélange ne varie plus après un temps fini. La loi de paroi LMF développée pour Snecma Moteurs (site de Vernon) dans la thèse de F. Dabireau ([24]) a été écrite sous l'hypothèse de mélange parfaitement homogène et de C_p constant. Elle peut donc servir de base au développement d'une loi de paroi en mélange gazeux multi-espèce inerte et parois inertes. Une adaptation de la loi LMF est ici proposée, de façon à prendre en compte les effets du nombre de Prandtl moléculaire ([45]) sur les constantes de la loi de paroi.

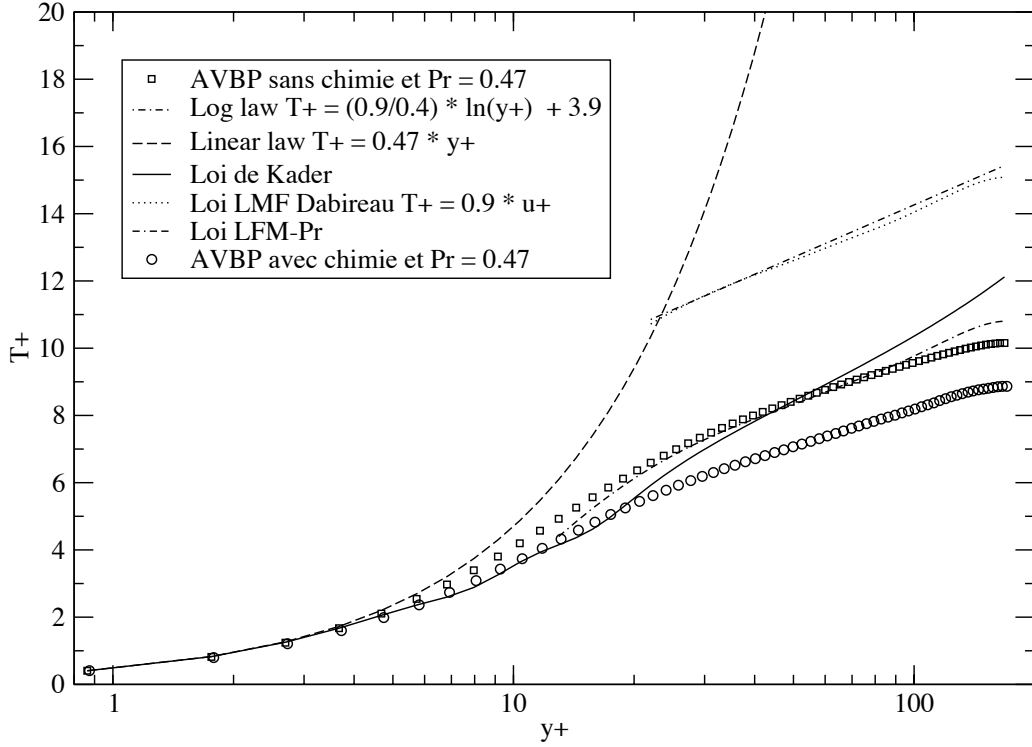


Fig. 1.32: Profil de T^+ à $Pr = 0.47$ dans la DNS avec mélange multi-espèce non réactif et parois inertes (avec ajout de T^+ à $Pr = 0.47$ avec chimie)

On reprend les étapes *i*) et *ii*) de la dérivation de la loi LMF (*cf* chapitre 2 sous-section 2.4.4 partie I), sauf qu'à présent on travaille avec C_1 non fixé *a priori*, et non pas avec $C_1 = 1$. On aboutit ainsi au système (LMF-Pr) :

$$\begin{cases} \frac{2}{Pr_t B_q} \left[\sqrt{C_1} - \sqrt{C_1 - Pr_t B_q u^+} \right] = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \\ T^+ = Pr_t u^+ - \frac{C_1 - 1}{B_q} \end{cases} \quad (1.17)$$

Deux contraintes doivent être vérifiées par la constante C_1 :

1. lorsque B_q tend vers zéro (*i.e.* lorsqu'on tend vers un cas isotherme), on veut retrouver la loi logarithmique pour la vitesse. Cela impose d'avoir (développement limité autour de zéro, de l'expression (1.17) pour la vitesse) :

$$C_1 \longrightarrow 1 \text{ quand } B_q \longrightarrow 0 ; \quad (1.18)$$

2. lorsque B_q tend vers zéro, on veut que T^+ reste bornée. Pour cela il suffit que le terme $C_1 - 1$ soit proportionnel à B_q , *i.e.* :

$$\frac{C_1 - 1}{B_q} = \text{constante} . \quad (1.19)$$

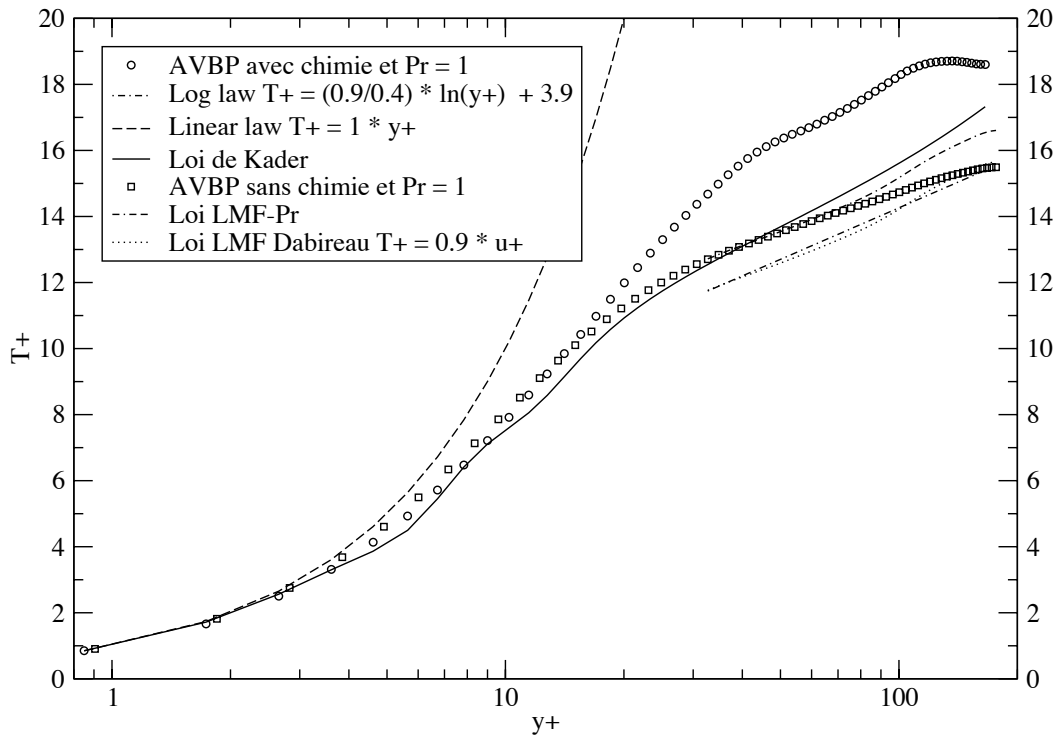


Fig. 1.33: Profil de T^+ à $Pr = 1$ dans la DNS avec mélange multi-espèce non réactif et parois inertes (avec ajout de T^+ à $Pr = 1$ avec chimie)

On peut faire dépendre du nombre de Prandtl moléculaire la constante de la relation (1.19). Notons $K(Pr)$ le terme $-\frac{C_1-1}{B_q}$.

Lorsque B_q est faible (cas isotherme et quasi isotherme), il existe une corrélation – la corrélation de Kader [45] – qui intègre le nombre de Prandtl moléculaire dans l'expression de T^+ . Pour un écoulement pleinement turbulent dans un tube de rayon h ou un canal de demi-hauteur h , la corrélation de Kader s'écrit :

$$T^+ = Pr y^+ \exp(-\Gamma) + \left[2.12 \ln \left((1 + y^+) \frac{1.5(2 - y/h)}{1 + 2(1 - y/h)^2} \right) + \beta(Pr) \right] \exp(-1/\Gamma) \quad (1.20)$$

avec

$$\Gamma = \frac{0.01(Pr y^+)^4}{1 + 5Pr^3 y^+} \quad (1.21)$$

et

$$\beta(Pr) = (3.85Pr^{1/3} - 1.3)^2 + 2.12 \ln(Pr) . \quad (1.22)$$

Cette corrélation a été validée par de nombreuses expériences. On pourrait donc écrire la constante $K(Pr)$ de sorte que la relation (1.17) redonne la corrélation de Kader lorsque B_q est petit. La nouvelle loi de paroi ainsi obtenue permettrait de prendre en compte la loi LMF et garantirait que l'effet du nombre de Prandtl moléculaire n'est pas négligé.

Cette idée a été développée, et les résultats obtenus pour le profil de T^+ à $Pr = 0.47$ et à $Pr = 1$ dans un cas sans chimie sont représentés aux figures 1.32 et 1.33 respectivement. Pour des nombres de Reynolds assez grands² et en imposant que la corrélation de Kader et la relation (1.17) donnent le même T^+ pour $y^+ = 100$, on arrive à la formule

$$K(Pr) = \beta(Pr) - Pr_t C + \left(2.12 - \frac{Pr_t}{\kappa}\right) \ln(100) \quad (1.23)$$

où $\beta(Pr)$ est définie par la relation (1.22) et où C désigne la constante additive présente dans la loi logarithmique pour la vitesse ($C = 5.5$ ici).

La loi LMF devient alors la loi (LMF-Pr) et s'écrit

$$\begin{cases} \frac{2}{Pr_t B_q} \left[\sqrt{C_1} - \sqrt{C_1 - Pr_t B_q u^+} \right] = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \\ T^+ = Pr_t u^+ + K(Pr) \end{cases} \quad (1.24)$$

avec $K(Pr)$ défini par la formule (1.23) et avec $C_1 = 1 - K(Pr) B_q$.

Fonctionnement de la loi de paroi LMF-Pr :

La constante $K(Pr)$ s'obtient en imposant à la loi LMF-Pr d'être cohérente avec la corrélation de Kader dans le cas d'un scalaire passif.

La relation (1.24) est un système de deux équations à deux inconnues τ_w et q_w . Les entrées de la loi de paroi (1.24) sont :

- la distance y entre la paroi solide et le centre de la première maille de calcul (supposée être située dans la zone pariétale turbulente) ;
- la vitesse tangentielle u et la température T à cette première maille ;
- la température T_w de la paroi.

Les constantes sont C , C_1 et K .

Ces paramètres étant connus, la loi de paroi (1.24) fournit le frottement pariétal τ_w et le flux de chaleur pariétal q_w , par résolution numérique [81] du système non linéaire (1.24).

Remarque :

Pour un nombre de Prandtl moléculaire égal à environ 0.89, la loi LMF-Pr redonne la loi LMF.

1.5 Conclusion

Les DNS exposées dans ce chapitre montrent qu'avec le code AVBP, la structure de la turbulence de paroi, ainsi que la plupart des résultats classiques en situations de turbulence quasi incompressible quasi isotherme et quasi incompressible anisotherme, ont été retrouvés. Le coût des simulations numériques directes a été minimisé en optant pour des domaines de simulation de taille réduite, mais suffisante pour qu'un écoulement turbulent

²Le nombre de Reynolds doit être grand de manière à avoir $y/h \ll 1$. Par ailleurs, dans la zone $y^+ \approx 100$, on a alors $\Gamma \gg 1$, d'où la loi de Kader fournit $T^+ \simeq 2.12 \ln(y^+) + \beta(Pr)$.

puisse s'y établir. Cela a facilité la mise en place de l'initialisation des calculs, du mélange gazeux multi-espèce avec schéma cinétique et de l'échauffement du canal. Les premiers outils de post-traitement ont également été développés. Nous possédons à présent la majorité des outils nécessaires à la réalisation de DNS de canal anisotherme avec mélange gazeux multi-espèce réactif. C'est ce que nous exposons au chapitre 2.

Par ailleurs, une loi de paroi permettant de tenir compte des variations du nombre de Prandtl moléculaire a été développée, et validée *a priori* par comparaison aux DNS. La validité de cette loi montre que le caractère multi-espèce du fluide n'introduit pas, à ce stade, de difficultés propres (l'effet du nombre de Prandtl moléculaire est identique pour un fluide homogène).

Chapitre 2

DNS en mélange multi-espèce réactif et parois inertes

A présent, on s'intéresse aux effets de la non-homogénéité du mélange, ainsi qu'aux effets de la chimie. On reprend pour ce faire la configuration de la DNS avec mélange multi-espèce non réactif et parois inertes, et on active le schéma cinétique afin de reproduire les changements de concentration des espèces.

Le caractère hétérogène du mélange gazeux induit de nombreuses nouveautés :

- les caractéristiques du mélange changent : les coefficients de transport (μ, ν, D_{ij}, \dots) ne peuvent pas être considérés comme constants par rapport à la température et ils sont influencés par la composition chimique locale du mélange ; il en est de même des propriétés thermodynamiques du mélange ($\rho, \lambda, C_p, \dots$) ;
- il existe un flux de chaleur associé à la diffusion des espèces ;
- l'équation de l'énergie admet un terme source chimique ;
- l'existence d'une zone à frottement constant et à flux de chaleur constant n'est plus garantie, or l'existence d'une telle zone est l'hypothèse de base dans la dérivation de la loi de paroi logarithmique classique pour la vitesse et de celle pour la température.

Les données expérimentales étant inexistantes, on se tourne vers la DNS afin de connaître les effets de l'hétérogénéité du mélange sur le flux de chaleur pariétal et le frottement pariétal.

2.1 Configuration de la DNS

La géométrie du domaine de calcul est rappelée par la figure 2.1.

Les murs supérieur et inférieur sont traités par une condition aux limites de mur isotherme non glissant, tandis qu'une condition de périodicité est appliquée dans les directions longitudinale et transverse.

La DNS réalisée est représentative des conditions thermodynamiques au niveau du convergent de la tuyère. A cet endroit, il règne une pression de 10 MPa et l'écoulement est largement subsonique. On utilise un nombre de Mach de l'ordre de 0.2 : cela permet

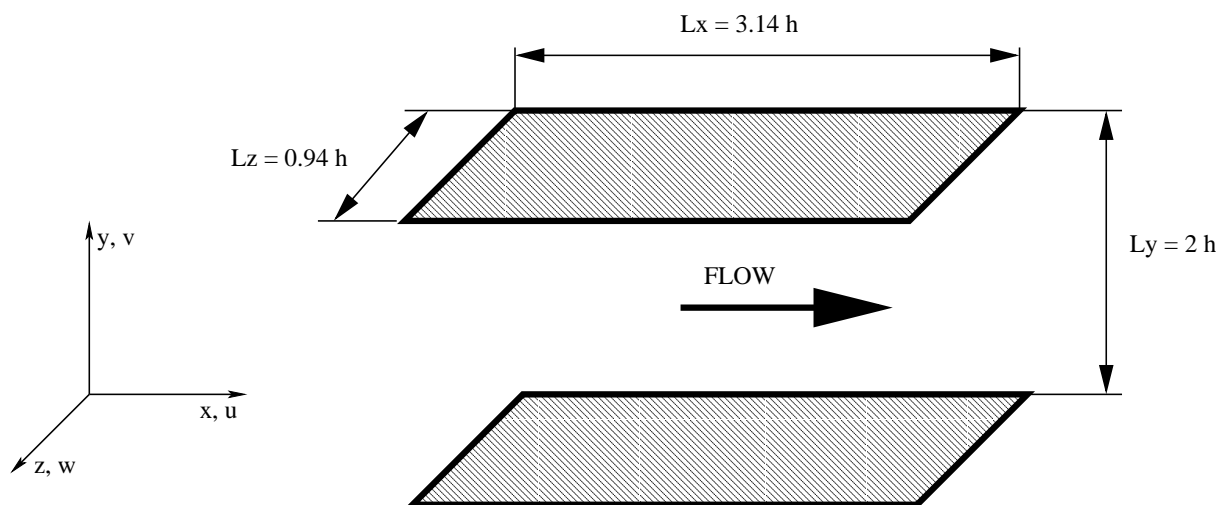


Fig. 2.1: Géométrie du domaine de calcul et système de coordonnées

d'éliminer les effets de compressibilité et de travailler avec un pas de temps pas trop petit.

Le coût numérique d'une DNS de canal est directement lié au nombre de Reynolds de frottement Re_τ . Celui-ci doit être choisi le plus petit possible, mais assez grand pour permettre l'établissement d'un écoulement turbulent. La valeur $Re_\tau = 180$, classiquement utilisée dans la littérature, a été initialement¹ choisie dans cette étude. Cela correspond à un nombre de Reynolds basé sur la vitesse axiale moyenne et sur la demi-hauteur du canal d'environ 3400.

La température moyenne est fixée de manière à reproduire le gradient de température des calculs de couches limites effectués par Snecma Propulsion Solide.

La connaissance de la pression, de la température de paroi, du gradient de température dans la couche limite, du nombre de Mach ainsi que du nombre de Reynolds de frottement permettent de calculer la demi-hauteur h du canal et donc de dimensionner le canal.

Le tableau 2.1 regroupe quelques données représentatives de notre configuration.

P (MPa)	T_{paroi} (K)	T_{moy} (K)	h (mm)	Ma_{max}	Re_τ
10	2700	3000	0.115	0.2	180

Tab. 2.1: Données relatives à la configuration de la DNS à $Re_\tau = 180$

Le maillage parallélépipédique du canal comporte $17 \times 130 \times 33$ nœuds. La résolution

¹Le nombre de Péclet Pe est le produit du nombre de Reynolds et du nombre de Prandtl moléculaire Pr . Le nombre de Prandtl moléculaire de notre mélange est égal à 0.47. Les DNS effectuées avec un nombre de Reynolds de friction de l'ordre de 180 risquent donc de conduire à des champs de température peu turbulents. Par conséquent, dans un second temps, la DNS a été réalisée à $Re_\tau = 280$. La demi-hauteur h du canal mesure alors 0.192 mm.

uniforme du maillage suivant les directions x et z (tableau 1.1) permet de capturer la structure allongée de la turbulence. Afin d'être en mesure de résoudre la sous-couche visqueuse, le maillage suit une loi de raffinement en tangente hyperbolique dans la direction y normale à l'écoulement. La distribution des nœuds dans cette direction est donnée par

$$y_j = \left(1 - \frac{\tanh\left(ah\left(1 - \frac{j-1}{ny-1}\right)\right)}{\tanh(ah)} \right) h \quad (2.1)$$

où ny est le nombre de nœuds de maillage dans la direction y , h la demi-hauteur du canal, et a un paramètre d'étirement. Dans les DNS réalisées, a est égal à 1.45 et ny à 130.

En termes d'unités de paroi, le domaine de calcul est caractérisé par les valeurs répertoriées dans le tableau 2.2.

Dimensions du canal en mètres	$L_x = \pi h$	$L_y = 2h$	$L_z = 0.3\pi h$
Dimensions du canal en unités de paroi	$L_x^+ \simeq 565$	$L_y^+ \simeq 360$	$L_z^+ \simeq 169$
Nombre de nœuds	$nx = 17$	$ny = 130$	$nz = 33$
Résolution du maillage	$\Delta x^+ \simeq 35$	$\Delta y^+ \simeq 0.9$ au mur $\Delta y^+ \simeq 5$ près de l'axe	$\Delta z^+ \simeq 5$

Tab. 2.2: Domaine de calcul ([70])

Dans cette DNS, on résout les équations de Navier-Stokes tridimensionnelles compressibles, non stationnaires, avec chimie et termes sources constants en espace.

Etant donné qu'ici $u_\tau \simeq 14$ m/s et $\rho_w \simeq 7.9$ kg/m³, le terme source S_{qdm} vaut environ 1.5×10^7 Pa/m.

Un terme source, noté S_e , est ajouté à l'équation de conservation de l'énergie totale de manière à maintenir le fluide à une température moyenne cible T_{cible} . Ce terme source S_e permet de reproduire le gradient de température dans la couche limite de la tuyère. Il chauffe le fluide en volume et s'exprime par la relation

$$S_e = \rho C_v \times \frac{T_{\text{cible}} - \langle T \rangle}{\tau_{S_e}} \quad (2.2)$$

où $\langle \rangle$ est l'opérateur de moyenne spatiale et où τ_{S_e} a la dimension d'un temps et peut être vu comme un temps de relaxation.

Dans ce calcul, la valeur donnée à τ_{S_e} représente 50% du temps de diffusion turbulente h/u_τ .

Le terme source S_e a été construit de manière à être constant lorsqu'on écrit l'équation de conservation de l'énergie totale avec la température. Notre problème étant essentiellement diffusif, S_e ne devrait pas trop modifier la forme des profils de température.

Ce calcul est initialisé avec une solution turbulente issue de la DNS avec mélange gazeux multi-espèce sans chimie et ayant atteint un état convergé.

Le mélange gazeux utilisé contient les sept espèces majoritaires H_2 , N_2 , CO , H_2O , CO_2 , H et OH (annexe B). Le code de calcul ne supposant pas l'équilibre chimique, un schéma cinétique a été mis au point et validé (annexe B) afin de reproduire les changements de concentration des espèces. Les propriétés thermodynamiques de chaque espèce du mélange équivalent ont été calculées grâce à la librairie EGLIB [28] et le tableau 2.3 recense le nombre de Schmidt de chaque espèce. La librairie EGLIB fournit aussi le nombre de Prandtl moléculaire du mélange : il est égal à 0.47.

Espèce	H_2	N_2	CO	H_2O	H	CO_2	OH
Sc	0.20	0.87	0.86	0.65	0.15	0.98	0.53

Tab. 2.3: Nombre de Schmidt Sc de chaque espèce pour $P = 10$ MPa

Ce mélange gazeux a été défini en accord avec Snecma Propulsion Solide. D'autre part, la méthodologie adoptée pour la dérivation des lois de paroi présentées dans cette thèse est totalement indépendante de la composition du mélange gazeux. Le mélange équivalent qui a été défini à l'annexe B doit donc être vu comme un "mélange test".

2.2 Intensité de la turbulence

La figure 2.2 montre l'évolution temporelle de la composante longitudinale de la vitesse d'un point situé au centre du canal. On observe des fluctuations de l'ordre de 15m/s, ce qui correspond à une intensité de turbulence u'/u_c de l'ordre de 5.5%.

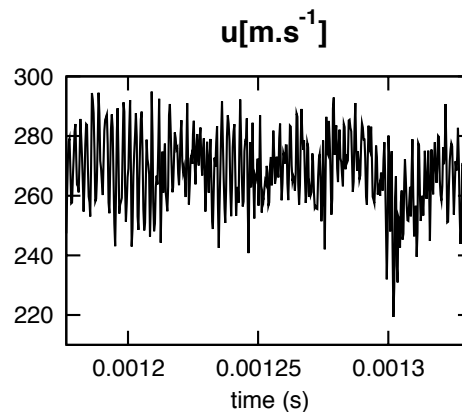


Fig. 2.2: Evolution temporelle de u au centre du canal avec mélange réactif et parois inertes, $Re_\tau = 180$ et $Pr = 0.47$

2.3 Effet de la chimie

Au cours de l'intégralité de la simulation numérique, les fractions massiques des espèces composant le mélange ne cessent de varier (figure 2.3). S'il n'y avait pas de schéma cinétique pour reproduire la chimie, on parviendrait à une situation de gaz homogène en un temps fini, car il n'y aurait que des processus d'homogénéisation (*cf* sous-section 1.4.1 du chapitre 1). A l'échelle de temps de la simulation numérique effectuée, la chimie peut donc être vue comme un moteur de l'hétérogénéité du mélange. Par contre, sur des temps beaucoup plus longs, la chimie conduit elle aussi à une situation de mélange homogène.

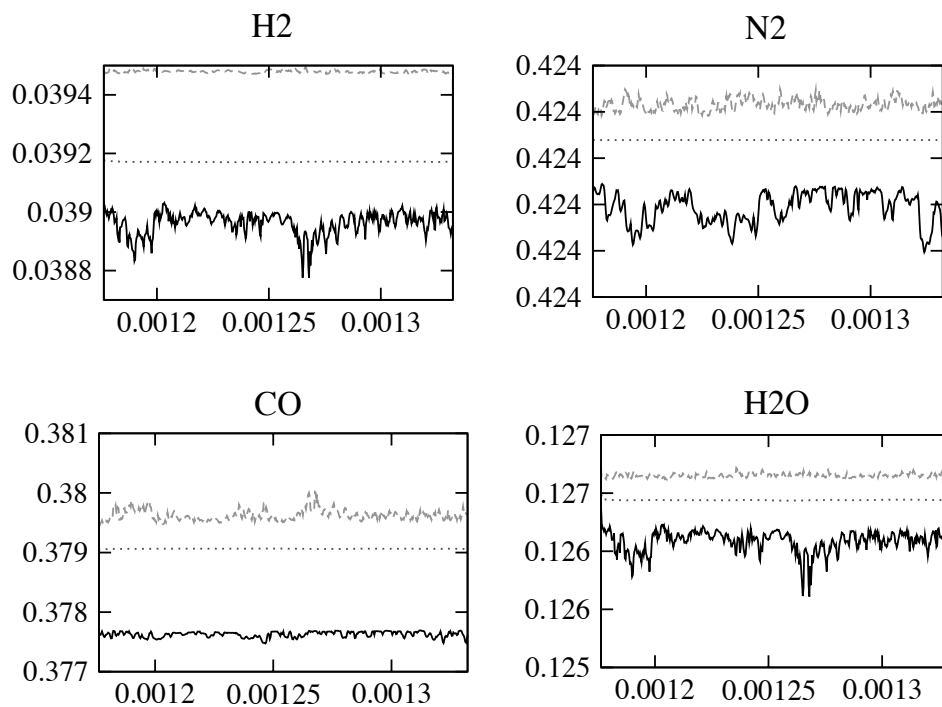


Fig. 2.3: Evolution temporelle des fractions massiques minimales, moyennes et maximales de H_2 , N_2 , CO et H_2O à $Re_\tau = 180$ et $Pr = 0.47$. - - - : Fraction massique maximale; ... : Fraction massique moyenne; — : Fraction massique minimale

2.4 Equilibre chimique

Connaissant le profil de température moyenne, on obtient le profil des fractions massiques à l'équilibre grâce aux courbes d'équilibre du mélange équivalent. Ces profils peuvent alors être comparés à ceux obtenus après post-traitement des champs de fractions massiques fournis par la DNS. Le graphique 2.4 permet d'affirmer que l'hypothèse d'équilibre chimique est bien vérifiée en moyenne dans la DNS avec mélange réactif et parois inertes.

De plus, la validité de l'hypothèse d'équilibre chimique est renforcée par le fait que :

- l'échelle de temps caractéristique de la chimie est la même dans la DNS que dans le mélange gazeux éjecté par la tuyère (*cf* annexe B) ;
- l'échelle de temps caractéristique de l'écoulement, définie par une longueur (δ pour l'écoulement dans la tuyère et h pour la DNS) et une vitesse (u_τ dans les deux cas), est plus grande dans le convergent de la tuyère que dans la DNS : en effet, δ vaut environ 1.4 mm (d'après les calculs de couche limite effectués par Snecma Propulsion Solide) et h mesure 0.115 mm, alors que les vitesses de frottement dans la DNS et l'écoulement réel sont presque les mêmes.

Vérifier l'hypothèse d'équilibre chimique diminue le nombre de variables indépendantes, ce qui simplifie la dérivation de la loi de paroi. En effet, le frottement pariétal τ_w et le flux de chaleur pariétal q_w sont alors des fonctions implicites de la vitesse et de la température uniquement, et non pas des fonctions implicites de la vitesse, de la température et de la composition chimique du mélange.

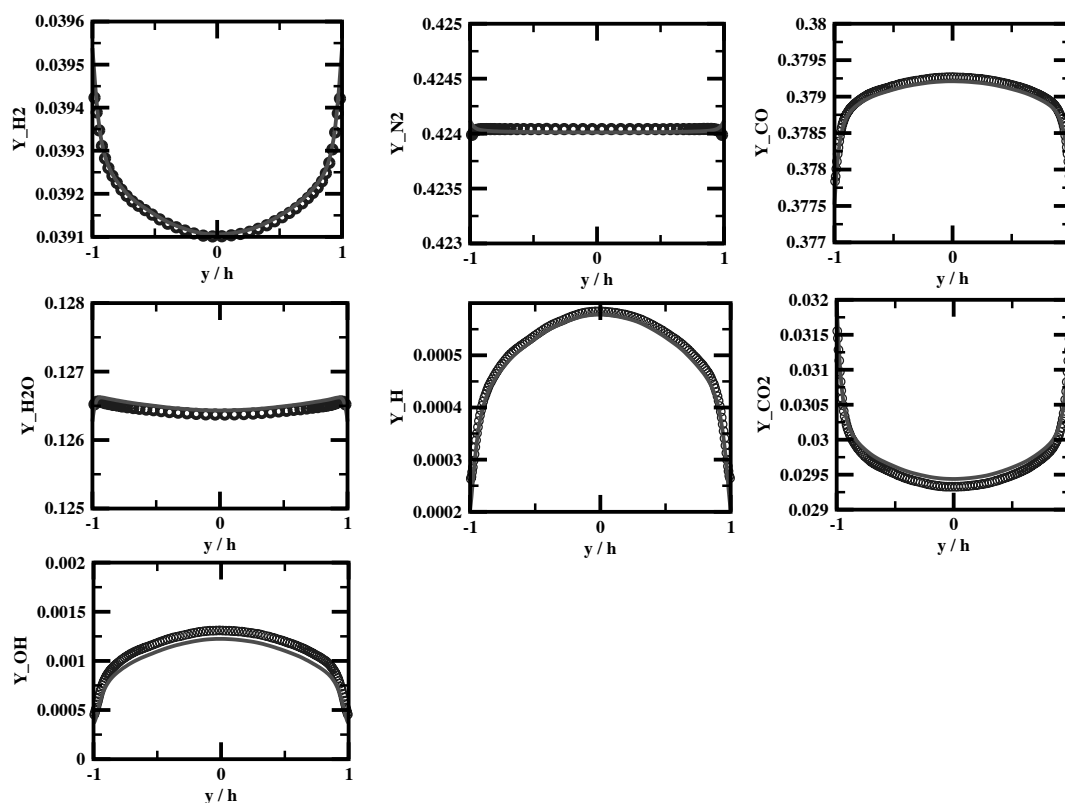


Fig. 2.4: Equilibre chimique dans le canal avec mélange réactif et parois inertes, à $Re_\tau = 180$. \circ : Fractions massiques moyennes obtenues par post-traitement de la DNS ; — : Fractions massiques à l'équilibre obtenues à partir du profil de température moyenne et des courbes d'équilibre

2.5 Influence de la chimie

Comme le montrent les figures 1.32 et 1.33, le problème de la sensibilité au nombre de Prandtl moléculaire est résolu grâce à la constante $K(Pr)$. La loi LMF-Pr permet d'avoir le bon niveau de T^+ pour $Pr = 0.47$ et $Pr = 1$, contrairement à la loi LMF. On observe cependant sur ces figures que la loi LMF-Pr, elle aussi, ne reproduit pas les résultats de la DNS avec chimie.

L'hypothèse indispensable à la dérivation des lois LMF, LMF-Pr et LTM pour la température est l'existence d'une zone où le flux de chaleur total varie peu. Pour un canal aux parois inertes, cela se traduit par

$$\frac{d\phi}{dy} \simeq S_e + uS_{qdm} \simeq S_e \quad (2.3)$$

où ϕ s'exprime comme la somme du flux de chaleur turbulent, du terme de Fourier et du terme lié à la diffusion moléculaire, lorsque le mélange gazeux multi-espèce est non réactif. Le terme source S_e étant constant (*cf* figure 2.8), on doit observer que le flux de chaleur total est linéaire en y , vaut q_w (resp. $-q_w$) à la paroi supérieure (resp. inférieure) et zéro sur l'axe du canal (*i.e.* en $y/h = 0$); ceci est confirmé par la figure 2.5 qui montre le flux de chaleur total ϕ en fonction de la distance aux parois dans le cas d'un calcul sans chimie à $Pr = 1$ (même résultat à $Pr = 0.47$).

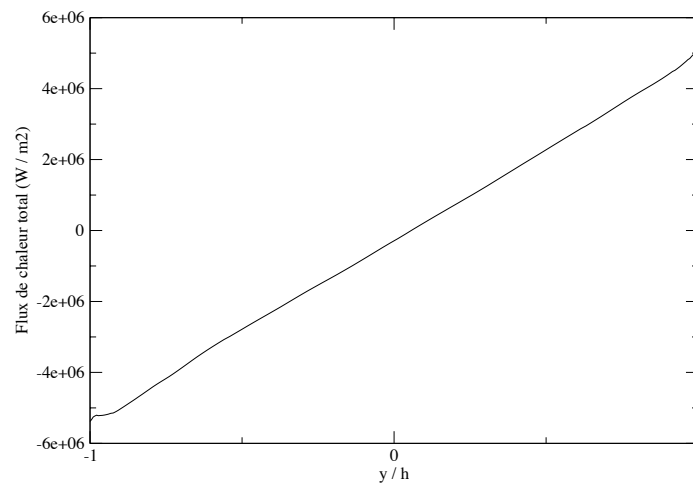


Fig. 2.5: Flux de chaleur total dans un canal multi-espèce sans chimie à $Pr = 1$ et $Re_\tau = 180$

Cependant, lorsqu'on introduit la chimie dans le canal avec parois inertes, la figure 2.6 montre que le flux de chaleur total ϕ devient non linéaire au voisinage des parois. Malgré cette non-linéarité, le flux de chaleur total ϕ vaut bien zéro en $y/h = 0$ et q_w (resp. $-q_w$) à la paroi supérieure (resp. inférieure).

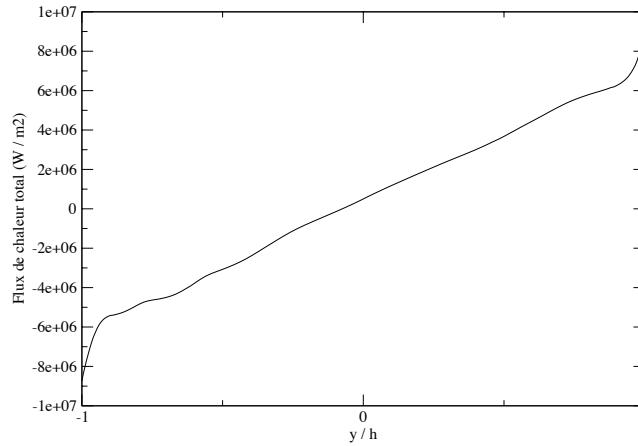


Fig. 2.6: Flux de chaleur total dans le canal minimal avec chimie et parois inertes à $Pr = 1$ et $Re_\tau = 180$

La DNS avec chimie et parois inertes montre donc que la relation (2.3) n'est plus vraie lorsque le mélange gazeux multi-espèce est un mélange réactif. Dans une telle situation, la figure 2.7 montre que le flux de chaleur total ϕ vérifie la relation :

$$\frac{d\phi}{dy} \simeq S_e + \dot{\omega}_T + uS_{qdm} \simeq S_e + \dot{\omega}_T . \quad (2.4)$$

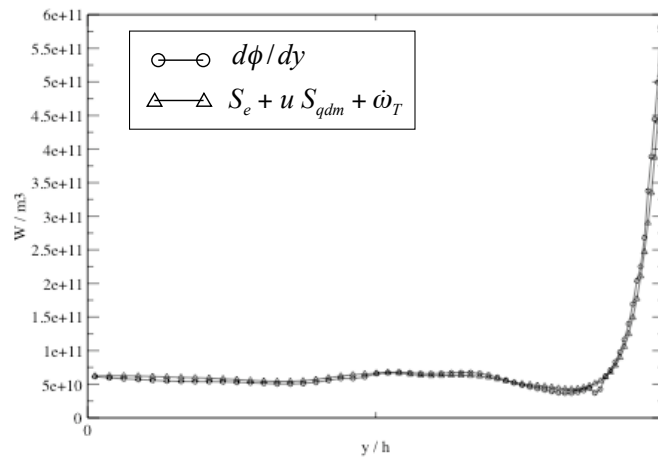


Fig. 2.7: Dérivée par rapport à y du flux de chaleur total pour le canal minimal avec chimie et parois inertes (demi-canal supérieur)

De plus, la figure 2.8 montre que le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ est non uniforme, non négligeable devant S_e , et cela indépendamment du nombre de Prandtl moléculaire. Il est donc normal que T^+ ne suive pas la loi LMF-Pr.

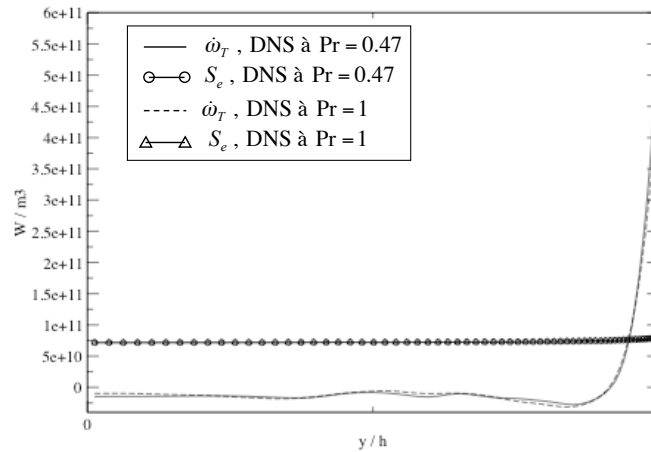


Fig. 2.8: Comparaison entre $\dot{\omega}_T$ et S_e à $Pr = 0.47$ et $Pr = 1$ pour le canal minimal avec parois inertes (demi-canal supérieur)

Il s'avère donc indispensable d'inclure le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ dans le bilan d'énergie dès lors que les espèces gazeuses composant le mélange réagissent entre elles. La difficulté tient alors au fait que $\dot{\omega}_T$ est une fonction de la distance à la paroi, inconnue *a priori*, et qu'elle ne peut donc pas être intégrée directement.

2.6 Bilan d'énergie

Les réactions chimiques entre les espèces gazeuses composant le mélange introduisent un terme nouveau, le dégagement de chaleur, dont il faut tenir compte dans l'établissement de l'équation de conservation de l'énergie totale.

L'enthalpie sensible h_s du mélange fait intervenir la composition chimique du mélange et elle est définie par :

$$h_s = \sum_{k=1}^{ns} Y_k h_{s,k} \quad (2.5)$$

avec

$$h_{s,k} = \int_0^T C_{p,k}(\theta) d\theta \quad (2.6)$$

L'équation de conservation de l'énergie écrite en terme d'enthalpie totale non chimique H

se formule ainsi :

$$\frac{\partial \rho H}{\partial t} + \frac{\partial U_j H}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^{ns} \rho Y_k V_j^k h_k \right) + \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial \tau_{ij} U_i}{\partial x_j} + \dot{\omega}_T + S_{\text{DNS}} \quad (2.7)$$

où $\dot{\omega}_T$ désigne le dégagement de chaleur dû aux réactions chimiques, où le vecteur vitesse a pour composantes $(U_j)_{j=1,3} = (u, v, w)$ et où le terme source S_{DNS} est la somme² de S_e et $u S_{\text{qdm}}$.

L'équation (2.7) ne permet pas de dériver une loi de paroi car $\dot{\omega}_T$ est une fonction de y que l'on ne connaît pas. Il est donc impossible de l'intégrer analytiquement.

Il faut en fait travailler avec l'enthalpie totale chimique h_t .

L'enthalpie h du mélange est définie par :

$$h = \sum_{k=1}^{ns} Y_k h_k \quad (2.8)$$

avec

$$h_k = \int_0^T C_{p,k}(\theta) d\theta + \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.9)$$

L'équation de conservation de l'enthalpie totale h_t (somme de l'enthalpie sensible, de l'enthalpie chimique et de l'énergie cinétique) s'écrit :

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial U_j h_t}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^{ns} \rho Y_k V_j^k h_k \right) + \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial \tau_{ij} U_i}{\partial x_j} + S_{\text{DNS}} \quad (2.10)$$

avec le vecteur vitesse de composantes $(U_j)_{j=1,3} = (u, v, w)$.

Après avoir moyenné l'équation (2.10) en espace suivant x et z , et en temps, on obtient :

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\overline{\rho v h_t} - \overline{\lambda \frac{\partial T}{\partial y}} + \sum_{k=1}^{ns} \overline{\rho Y_k V_2^k h_k} \right) = S_{\text{DNS}} \quad (2.11)$$

Moyenner en x , z et t l'équation de continuité conduit à :

$$\frac{\partial \overline{\rho v}}{\partial y} = 0 \quad (2.12)$$

Il résulte de la condition de non-glissement de la vitesse à la paroi que :

$$\tilde{v} = 0 \quad \forall y. \quad (2.13)$$

La décomposition du terme $\overline{\rho v h_t}$ conduit donc à :

$$\overline{\rho v h_t} \equiv \bar{\rho} \tilde{v} h_t = \bar{\rho} \widetilde{v'' h_t''} \quad (2.14)$$

² $S_e + u S_{\text{qdm}} \simeq S_e$

L'enthalpie totale chimique est la somme de trois contributions : l'enthalpie sensible, l'enthalpie chimique et l'enthalpie cinétique. Etant donné qu'on travaille à Mach faible ($Ma = 0.2$), la partie cinétique est négligeable, et ainsi :

$$h_t \simeq \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{k=1}^{ns} Y_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.15)$$

Le terme $\bar{\rho} \widetilde{v'' h_t''}$ est alors approché par :

$$\bar{\rho} \widetilde{v'' h_t''} \simeq \bar{\rho} \overline{C_p} \widetilde{v'' T''} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^{ns} \widetilde{v'' Y_k''} \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.16)$$

Au final, l'équation (2.11) est approchée par la relation :

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\bar{\rho} \overline{C_p} \widetilde{v'' T''} + \bar{\rho} \sum_{k=1}^{ns} \widetilde{v'' Y_k''} \Delta h_{f,k}^0 - \lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} + \sum_{k=1}^{ns} \overline{\rho Y_k V_2^k h_k} \right) \simeq S_{DNS} \quad (2.17)$$

Le terme $\bar{\rho} \overline{C_p} \widetilde{v'' T''}$ représente le flux de chaleur turbulent. Le terme $\bar{\rho} \sum_{k=1}^{ns} \widetilde{v'' Y_k''} \Delta h_{f,k}^0$ symbolise le flux de chaleur induit par la diffusion turbulente des espèces. $-\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial y}$ est le terme classique de Fourier, tandis que $\sum_{k=1}^{ns} \overline{\rho Y_k V_2^k h_k}$ exprime la diffusion moléculaire des espèces. La somme de ces quatre termes constitue le flux d'enthalpie totale. Le terme de forçage S_{DNS} étant constant, on doit trouver que le flux d'enthalpie totale est linéaire.

Grâce à la DNS, on connaît en tout point du canal les valeurs de chacun des termes composant le flux d'enthalpie totale (figure 2.9). On peut donc déterminer quels sont les effets prépondérants dans la zone turbulente. La zone turbulente est la zone qui nous intéresse car c'est là que se trouve le nœud de maillage où sera appliquée la loi de paroi.

L'exploitation des résultats de la DNS fournit deux informations importantes :

- comme prédit par l'analyse des équations, la DNS exhibe un flux d'enthalpie totale linéaire ;
- d'autre part, on constate que la somme du flux de chaleur turbulent et de la diffusion turbulente des espèces (courbe en pointillés de la figure 2.9) constitue une très bonne approximation du flux d'enthalpie totale dans la zone turbulente : en effet, les deux courbes sont très proches l'une de l'autre dans la zone turbulente, et le flux de chaleur pariétal peut être extrapolé en prolongeant jusqu'à la paroi la courbe en pointillés.

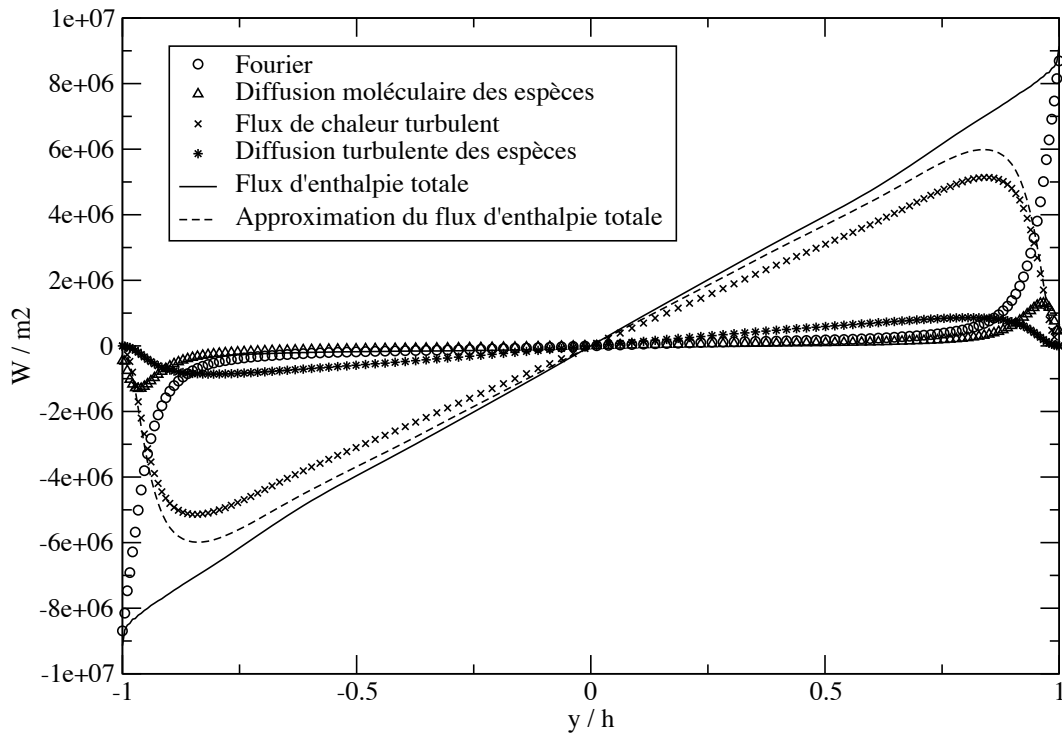


Fig. 2.9: Bilan d'énergie dans la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$.

2.7 Frottement pariétal

Comme dans le cas sans chimie, dans la zone logarithmique, le frottement pariétal τ_w est donné par :

$$\tau_w \simeq -\bar{\rho} \widetilde{u''v''} = -\bar{\rho} \overline{u'v'} \quad (2.18)$$

La figure 2.10 montre que le flux de quantité de mouvement $\bar{\mu} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} - \bar{\rho} \widetilde{u''v''}$ est bien linéaire d'une paroi à l'autre, et elle corrobore la relation (2.18). Le flux turbulent de quantité de mouvement $-\bar{\rho} \widetilde{u''v''}$ constitue une très bonne approximation du flux de quantité de mouvement dans la zone turbulente, et le frottement pariétal τ_w peut être extrapolé en prolongeant jusqu'à la paroi la courbe du flux turbulent de quantité de mouvement. Par ailleurs, la modélisation de ce flux par l'hypothèse de Boussinesq couplée à l'hypothèse de longueur de mélange de Prandtl, est encore valide.

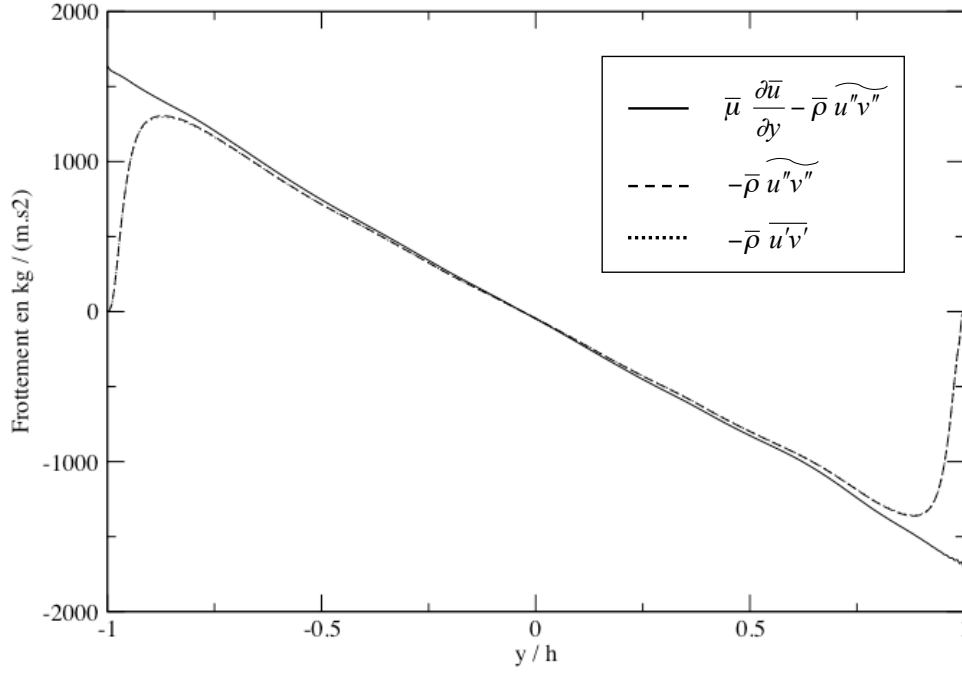


Fig. 2.10: Flux de quantité de mouvement $\bar{\mu} \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} - \bar{\rho} \widetilde{u''v''}$ dans la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$.

2.8 Flux de chaleur pariétal

Etant donné que le coût d'une DNS est directement lié au nombre de Reynolds de frottement Re_τ , l'écoulement de canal a été simulé à $Re_\tau = 280$ (afin d'avoir un nombre de Péclet $Pe = Re_\tau Pr$ supérieur à 100). Cependant, l'écoulement réel présente un Re_τ nettement plus élevé (de l'ordre de 10 000, par exemple). La valeur de Re_τ n'altère nullement la validité et la pertinence vis-à-vis du cas réel, des raisonnements élaborés en s'appuyant sur les données générées par la DNS. Dans une approche RANS haut-Reynolds, le premier nœud intérieur au maillage auquel est appliquée la loi de paroi, se situe toujours dans la zone turbulente à une altitude $y^+ \approx 100$. Dans le cas de la DNS à $Re_\tau = 280$, un y^+ de l'ordre de 100 correspond environ au tiers de la demi-hauteur h du canal (car $Re_\tau = h^+$), tandis que dans un cas réel avec $Re_\tau \approx 10\,000$, un tel y^+ représente 1% de la demi-hauteur du canal. Ainsi, plus Re_τ est grand, plus la zone turbulente de proche paroi où s'applique la loi de paroi est mince. De fait, le flux d'enthalpie totale dans la zone pariétale turbulente est très proche du flux de chaleur à la paroi, et on peut négliger l'évolution linéaire du flux d'enthalpie totale d'une paroi solide à l'autre.

Par conséquent, à haut-Reynolds, la zone pariétale turbulente est caractérisée par :

$$\bar{\rho} \bar{C}_p \widetilde{v''T''} + \sum_{k=1}^{ns} \bar{\rho} \widetilde{v''Y_k''} \Delta h_{f,k}^0 \simeq q_w \quad (2.19)$$

Le flux de chaleur turbulent $\bar{\rho} \overline{C_p} \widetilde{v''T''}$ est modélisé de manière classique par la formule :

$$\bar{\rho} \overline{C_p} \widetilde{v''T''} \approx -\frac{\mu_t C_p}{Pr_t} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (2.20)$$

Comme dit précédemment, les fluctuations de densité sont faibles dans notre étude, et les corrélations issues de la moyenne de Favre sont de fait très proches des corrélations issues de la moyenne de Reynolds.

La figure (2.11) confirme la bonne adéquation entre le flux de chaleur turbulent issu de la DNS et la formule choisie pour le modéliser.

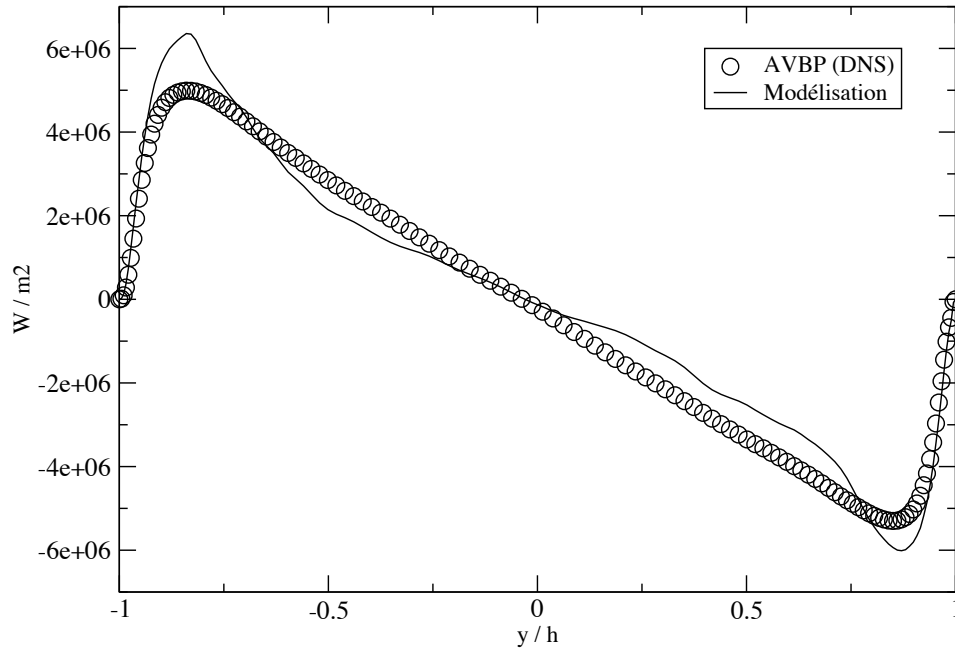


Fig. 2.11: Flux de chaleur turbulent $\bar{\rho} \overline{C_p} \widetilde{v''T''} \Delta h_{f,k}^0$ de la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$.

La figure (2.12) indique que les moyennes de Favre $\widetilde{v''Y_{H_2O}''}$ et de Reynolds $\overline{v''Y_{H_2O}''}$ se superposent.

Le flux de masse turbulent $\widetilde{v''Y_k''}$ de l'espèce k est modélisé par une loi de type gradient à laquelle on applique l'hypothèse d'équilibre chimique :

$$\bar{\rho} \widetilde{v''Y_k''} \approx -\frac{\mu_t}{Sc_{k,t}} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial \bar{X}_k}{\partial y} \approx -\frac{\mu_t}{Sc_{k,t}} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{d\bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (2.21)$$

La figure (2.13) montre le flux de chaleur induit par la diffusion turbulente des espèces $\sum_{k=1}^{ns} \bar{\rho} \widetilde{v''Y_k''} \Delta h_{f,k}^0$ et atteste la validité de cette modélisation.

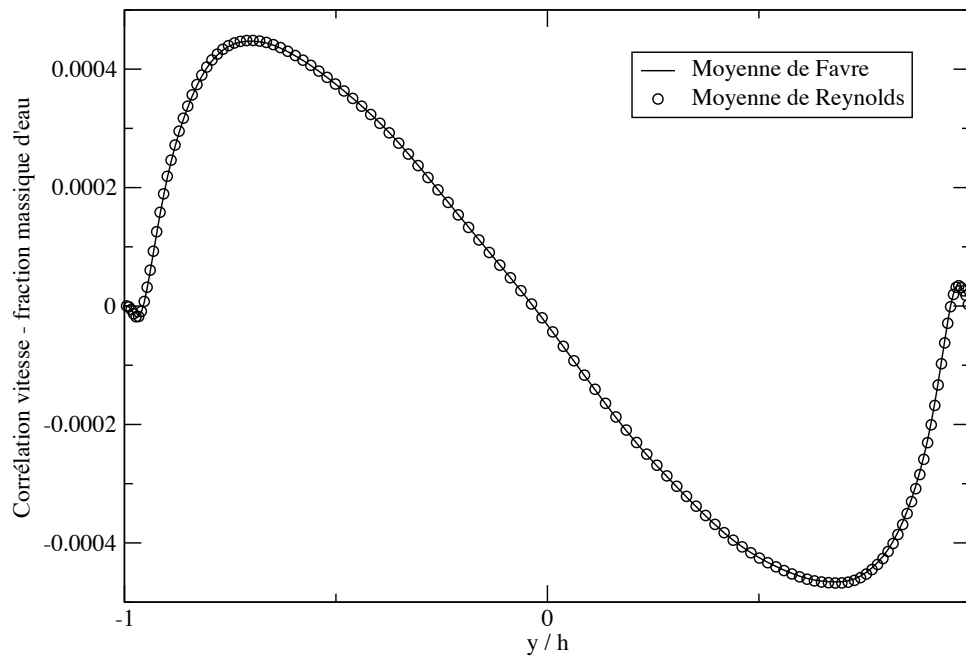


Fig. 2.12: Profils de $\bar{\rho} \widetilde{v''Y_{H_2O}''}$ et $\bar{\rho} \overline{v'Y_{H_2O}'}$, $Re_\tau = 280$.

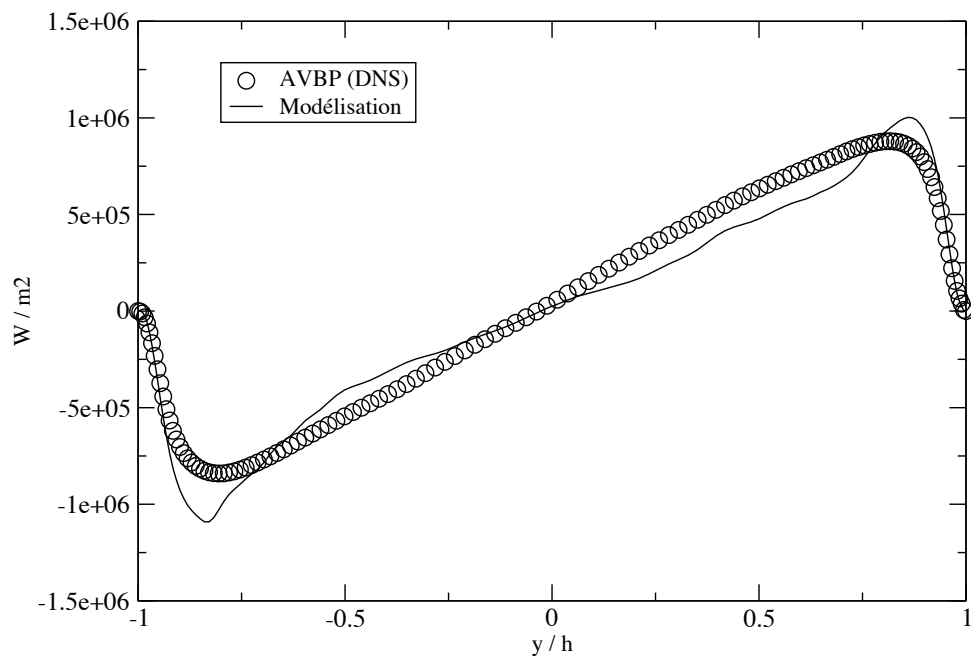


Fig. 2.13: Flux de chaleur induit par la diffusion turbulente des espèces $\sum_{k=1}^{n_s} \bar{\rho} \overline{v'Y_k'} \Delta h_{f,k}^0$ de la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$.

Par conséquent, le flux de chaleur pariétal q_w est modélisé par l'expression :

$$q_w \approx -\mu_t \left(\frac{C_p}{Pr_t} + \frac{1}{Sc_t} \sum_{k=1}^{ns} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{d\bar{T}} \Delta h_{f,k}^0 \right) \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (2.22)$$

2.9 Lois de paroi

Dans cette section, une adaptation de la loi LMF-Pr, exposée à la sous-section 1.4.3 du chapitre 1, est proposée de façon à prendre en compte les effets de la chimie, tout en conservant la dépendance au nombre de Prandtl moléculaire et le couplage vitesse-température.

Le point de départ pour l'écriture de la loi de paroi LMF-Pr-chimie sont les expressions du frottement pariétal τ_w et du flux de chaleur pariétal q_w , à partir de quantités estimées dans la zone turbulente :

$$\tau_w = -\bar{\rho} \widetilde{u''v''} \quad (2.23)$$

et

$$q_w = -\mu_t \left(\frac{C_p}{Pr_t} + \frac{1}{Sc_t} \sum_{k=1}^{ns} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{d\bar{T}} \Delta h_{f,k}^0 \right) \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (2.24)$$

En appliquant l'hypothèse de Boussinesq et l'hypothèse de longueur de mélange de Prandtl à l'équation (2.23), on obtient :

$$\tau_w = \bar{\rho} (\kappa y)^2 \left(\frac{d\bar{u}}{dy} \right)^2. \quad (2.25)$$

Après adimensionnement de l'équation (2.25), son intégration indique que la transformation de Van Driest suit une loi logarithmique :

$$u_{VD}^+ = \int_0^{U^+} \left(\frac{\bar{\rho}}{\rho_w} \right)^{1/2} du^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (2.26)$$

où C est une constante.

Il est à noter que les manipulations effectuées sur τ_w sont les mêmes que pour LMF et LMF-Pr.

A ce stade on ne peut pas calculer l'intégrale de l'équation (2.26) car le rapport $\bar{\rho}/\rho_w$ n'est pas connu. Pour ce faire, utilisons l'équation (2.24) du flux de chaleur pariétal. L'adimensionnement du quotient q_w/τ_w conduit, après intégration, à :

$$\frac{\bar{T}}{T_w} = C_1 - \alpha U^+ \quad (2.27)$$

avec

$$\alpha = \frac{C_p B_q}{\frac{C_p}{Pr_t} + \frac{1}{\bar{W}} \sum_{k=1}^{ns} \frac{1}{Sc_t} W_k \frac{d\bar{X}_k}{d\bar{T}} \Delta h_{f,k}^0} \quad (2.28)$$

et

$$B_q = \frac{q_w}{\rho_w C_p u_\tau T_w} \quad (2.29)$$

La constante C_1 n'est pas égale à l'unité, mais on a [8] :

$$C_1 \approx 1 \quad (2.30)$$

Etant convenu que la pression thermodynamique est constante à travers la couche limite, on a $\rho_w/\bar{\rho} \simeq \bar{T}/T_w$. Par conséquent, en combinant les équations (2.26) et (2.27), on aboutit à la loi de paroi couplée LMF-Pr-chimie, qui s'écrit :

$$\begin{cases} \frac{2}{\alpha} \left(\sqrt{C_1} - \sqrt{C_1 - \alpha U^+} \right) = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \\ T^+ = -\frac{T - T_w}{T_\tau} = \frac{\alpha}{B_q} U^+ + K(Pr) \end{cases} \quad (2.31)$$

avec

$$C_1 = 1 - K(Pr) B_q \quad (2.32)$$

La constante $K(Pr)$ s'obtient en imposant à la loi LMF-Pr-chimie d'être cohérente avec la corrélation de Kader dans le cas d'un scalaire passif.

La chimie apparaît à travers le terme α , et le flux de chaleur à travers B_q (qui est un flux de chaleur adimensionné).

On remarque que la loi LMF-Pr-chimie se dégrade exactement en la loi LMF-Pr lorsque la chimie n'est pas présente. En effet, le terme α est alors égal à $Pr_t B_q$, et le système (2.31) est équivalent au système (1.24).

Fonctionnement de la loi de paroi LMF-Pr-chimie :

La relation (2.31) est un système de deux équations à deux inconnues τ_w et q_w . Les entrées de la loi de paroi (2.31) sont :

- la distance y entre la paroi solide et le centre de la première maille de calcul (supposée être située dans la zone pariétale turbulente) ;
- la vitesse tangentielle u et la température T à cette première maille ;
- la composition du mélange, par interpolation dans les courbes d'équilibre du type de celles données en annexe B (figure B.7 par exemple) ;
- la température T_w de la paroi.

Les constantes sont C , C_1 , $K(Pr)$, Pr_t et Sc_t . On prend typiquement $Pr_t = 0.9$ et $Sc_t = 1$. Ces paramètres étant connus, la loi de paroi (2.31) fournit le frottement pariétal τ_w et le flux de chaleur pariétal q_w , pour une courbe d'équilibre donnée.

2.10 Profils de température et de vitesse

A présent, comparons les profils de température (figure 2.14) et de vitesse (figure 2.15) fournis par différentes lois de paroi à ceux issus de la DNS.

2.10.1 Profil de température

La loi de paroi LMF n'est pas capable de reproduire les résultats de la DNS car :

- contrairement à la loi LMF-Pr, la loi LMF ne tient pas compte des variations du nombre de Prandtl moléculaire Pr , et elle est construite pour Pr proche de l'unité (hors ici $Pr = 0.47$) ;
- même si le mélange est toujours assez proche de l'équilibre chimique, le dégagement de chaleur provoqué par les réactions chimiques est suffisamment grand et non uniforme en espace pour empêcher la loi LMF d'être valide, et l'équation (2.19) doit être utilisée pour modéliser le flux de chaleur pariétal.

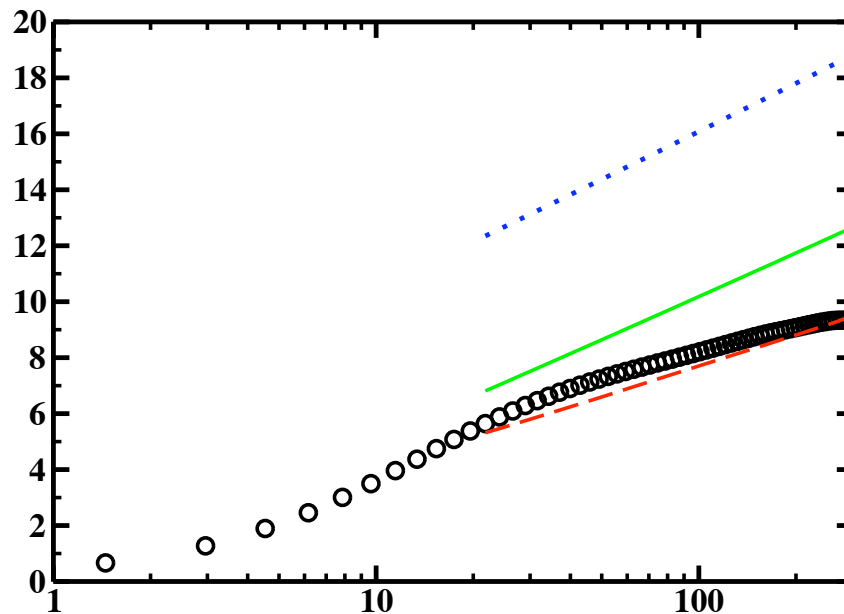


Fig. 2.14: Profil de température de la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$. \circ : DNS ; — — — : Loi de paroi LMF-Pr-chimie ; — : Loi LMF-Pr ; ... : Loi LMF

La prise en compte de la chimie permet d'avoir :

- un meilleur niveau de T^+ ;
- une meilleure pente de T^+ . C'est un point important pour une loi de paroi, car cela rend le modèle assez peu dépendant du y^+ utilisé en RANS, grandeur qui n'est pas connue *a priori*.

2.10.2 Profil de vitesse

Les lois LMF-Pr-chimie, LMF et logarithmique fournissent des profils de vitesse assez proches les uns des autres, même si la loi LMF-Pr-chimie donne le profil de vitesse le plus proche des résultats de la DNS.

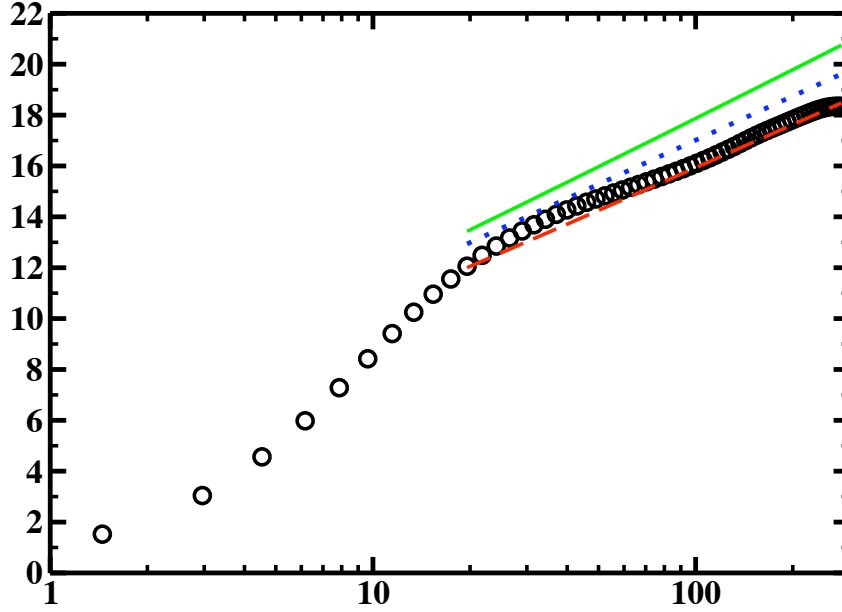


Fig. 2.15: Profil de vitesse de la DNS avec chimie, $Re_\tau = 280$. \circ : DNS ; $---$: Loi de paroi LMF-Pr-chimie ; $—$: Loi LMF ; \dots : Loi logarithmique

2.11 Loi de paroi à Mach élevé pour un mélange multi-espèce réactif

Les effets liés au nombre de Mach élevé peuvent être pris en compte comme dans la thèse [24].

À Mach élevé, l'énergie de dissipation visqueuse (effet Joule) ne peut plus être négligée : le terme $\frac{\partial \tau_{ij} U_i}{\partial x_j}$ de l'équation (2.10) de conservation de l'enthalpie totale doit donc être gardé lors de la dérivation de la loi de paroi, et modélisé. Par conséquent, à nombre de Mach élevé, le flux de chaleur pariétal est approché par la relation :

$$q_w \approx -\mu_t \left(\frac{C_p}{Pr_t} + \frac{1}{Sc_t} \sum_{k=1}^{ns} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{dT} \Delta h_{f,k}^0 \right) \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} - \mu_t \frac{d\bar{U}}{dy} \bar{U} \quad (2.33)$$

en modélisant le terme $\frac{\partial \tau_{ij} U_i}{\partial x_j}$ par $\mu_t \frac{d\bar{U}}{dy} \bar{U}$.

Il s'agit en fait de l'équation (2.22) où l'effet Joule n'est pas négligé.

Comme pour le cas à faible nombre de Mach, la viscosité turbulente μ_t est modélisée à l'aide de l'hypothèse de longueur de mélange de Prandtl.

Pour le frottement pariétal τ_w , on a la même relation qu'à Mach faible (équation (2.25) rappelée ci-dessous) :

$$\tau_w = \bar{\rho} (\kappa y)^2 \left(\frac{d\bar{u}}{dy} \right)^2. \quad (2.34)$$

La transformée de Van Driest restant valable à Mach élevé, il est à nouveau nécessaire d'évaluer le rapport $\bar{\rho}/\rho_w$. Pour ce faire, on évalue le rapport q_w/τ_w , on l'adimensionne et on l'intègre suivant U^+ . Cela conduit à :

$$\frac{\bar{T}}{T_w} = C_1 - \alpha U^+ - \frac{\tau_w Pr_t}{2\rho_w C_p T_w} U^{+2} \quad (2.35)$$

A Mach élevé, l'équation (2.27) est donc remplacée par une expression quadratique. L'injection de la relation (2.35) dans la transformation de Van Driest permet alors de calculer l'intégrale de la transformation de Van Driest, et on obtient une loi de paroi couplée vitesse-température qui tient compte de la chimie et qui est adaptée à tout nombre de Mach. Plus précisément, cette loi s'écrit (loi LTM-Pr-chimie) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C = \frac{\sqrt{B}}{u_\tau} \left[\arcsin \left(\frac{A + u_\tau u^+}{\sqrt{A^2 + C_1 B}} \right) - \arcsin \left(\frac{A}{\sqrt{A^2 + C_1 B}} \right) \right] \\ T^+ = -\frac{T - T_w}{T_\tau} = \frac{\alpha}{B_q} u^+ + K(Pr) + \frac{u_\tau^2}{B B_q} u^{+2} \end{array} \right. \quad (2.36)$$

avec :

$$B = \frac{2C_p T_w}{Pr_t} \quad (2.37)$$

et

$$A = \frac{\alpha B}{2u_\tau} \quad (2.38)$$

Le terme α est défini par la relation (2.28) et la chimie apparaît dans ce terme.

Le flux de chaleur adimensionné B_q est défini par la relation (2.29).

La constante C_1 est donnée par la relation (2.32).

Il est à noter que cette loi redonne naturellement la loi LMF-Pr-chimie lorsque le nombre de Mach est faible.

2.12 Conclusion

Grâce aux DNS, deux sources d'erreur ont été identifiées dans les lois de paroi LMF et LTM développées dans la thèse de F. Dabireau ([24]) : l'effet du nombre de Prandtl moléculaire d'une part, l'effet de la chimie d'autre part. Nous disposons à présent d'une loi de paroi couplée vitesse-température qui tient compte des effets de la variation du nombre de Prandtl moléculaire, ainsi que des effets de la chimie (loi LMF-Pr-chimie). La validité de cette loi repose sur le fait que l'hypothèse d'équilibre chimique est vérifiée dans le cas du mélange gazeux multi-espèce réactif avec parois inertes. Par contre, la loi de paroi ainsi développée est totalement indépendante des espèces composant le mélange gazeux réactif. Pour appliquer la loi LMF-Pr-chimie à un autre mélange gazeux réactif, il suffit juste de connaître les coefficients des courbes d'équilibre qui permettent de déterminer la

composition du mélange (les fractions massiques) à partir de la connaissance du champ de température. Ces courbes d'équilibre peuvent être obtenues grâce à la librairie de programmes CHEMKIN [87], par exemple. De plus, une extension au cas des écoulements supersoniques est également proposée.

Troisième partie
Prise en compte de l'ablation

Chapitre 1

Ablation

L'ablation désigne l'ensemble des phénomènes physico-chimiques subis par un matériau exposé à des sollicitations aérothermiques sévères, telles celles, par exemple, des propulseurs à propergol solide, ou des corps de rentrée atmosphérique. Suite à l'élévation de température, le matériau subit généralement des transformations internes (pyrolyse) en injectant dans le fluide des produits volatils, puis différentes réactions chimiques se produisent à la paroi, entre le matériau et le fluide.

L'ablation se traduit par un transfert de masse du matériau vers le fluide. Ce phénomène est souvent appelé érosion thermo-chimique. La dissipation d'énergie due à ces réactions retarde la pénétration de la chaleur dans le matériau. On parle ainsi de protection thermique par ablation.

Les matériaux ablatifs trouvent application dans :

- les boucliers thermiques des engins hypersoniques rentrant dans l'atmosphère ;
- les tuyères propulsives des moteurs-fusées ;
- les protections thermiques internes des corps de propulseurs.

Deux types de matériaux sont à distinguer :

- les matériaux pyrolysables, qui associent un renfort réfractaire (amiante, verre, silice, carbone, . . .) et une résine dont la décomposition thermique s'accompagne d'un résidu carboné important (coke) ;
- les matériaux réfractaires, dont les plus utilisés sont les carbone/carbone.

1.1 Importance technique et scientifique

L'utilisation de propergols hautement énergétiques dans les moteurs-fusées génère un besoin en matériaux capables de supporter les température et pression très élevées résultant de leur combustion. Les composites carbone/carbone et les autres matériaux graphitiques sont ainsi présents dans les revêtements protecteurs des parois des tuyères. Ces matériaux subissent également une attaque chimique par les produits de la combustion des propergols : il s'agit du phénomène d'ablation, au cours duquel les parois des tuyères perdent de la matière, ce qui engendre une récession de leur surface. Au col de la tuyère, cette récession

altère le ratio d'expansion, provoquant une détérioration des performances de la tuyère. Cette diminution des performances doit être évaluée et prise en compte lors de la phase de conception du moteur. Un moyen de déterminer cette diminution des performances est d'effectuer des essais d'allumage de ces moteurs à échelle réelle. Cependant, cette méthode est source de dépenses considérables et prend beaucoup de temps. Une alternative efficace et plus économique est l'établissement d'un modèle destiné à prédire avec précision le taux de récession de la surface. L'optimisation de l'épaisseur des protections thermiques qui en résulte, permet de réduire de façon significative le coût des engins hypersoniques et des propulseurs (meilleur indice de charge utile), et influe grandement sur leur conception.

1.2 Mécanismes de contrôle et modélisation de l'ablation

De nombreuses études expérimentales et théoriques ont été entreprises afin de décrypter le comportement thermo-ablatif des composites carbone/carbone et des matériaux graphitiques. Elles ont permis de déterminer les mécanismes régissant la récession des parois carbonées, et de développer des modèles reliant le taux de récession de telles parois à la composition chimique du propergol, aux conditions de fonctionnement du moteur ainsi qu'aux propriétés des matériaux.

1.2.1 Facteurs influants et mécanismes de contrôle

Les expériences pratiques et théoriques menées avec différents propergols, différents moteurs et sur des temps de fonctionnement allant de cinq secondes à soixante secondes, révèlent, qu'au col de la tuyère :

1. l'attaque chimique des parois carbonées par des espèces oxydantes (principalement H_2O et CO_2 d'après [55]), plus que l'érosion mécanique, est le phénomène prépondérant dans la récession des parois ([33], [55]). Ces expériences montrent aussi que le taux de récession dépend de la concentration en espèces oxydantes dans la zone de proche paroi, et qu'il est proportionnel à la concentration globale des espèces oxydantes H_2O , CO_2 et OH , et inversement proportionnel à celle de H_2 et CO ;
2. le taux de récession du carbone/carbone diminue fortement lorsque la teneur en aluminium du propergol augmente, bien que la température de la flamme augmente ([33], [55],[51]) ;
3. le choix de la cinétique chimique influence significativement le taux de récession, mais ses effets diminuent avec l'augmentation de la teneur en aluminium ([51]) ;
4. le taux de récession du carbone/carbone est également considérablement influencé par la pression régnant dans la chambre de combustion, et il diminue lorsque celle-ci diminue ([55]).
5. le taux de récession des composites carbone/carbone et des matériaux graphitiques est inversement proportionnel à leur densité ([77]) ;

6. le taux de récession décroît lorsque la conductivité thermique du matériau recouvrant les parois augmente ([52]) ;
7. il n'y a pas de corrélation entre le taux de récession du carbone/carbone et la température de la flamme ([55]) ;
8. le taux de récession décroît lorsque la rugosité de la surface des parois diminue, en conséquence de la prédominance de la chimie sur l'érosion mécanique ;
9. la géométrie de la chambre de combustion et son volume influencent fortement le taux de récession ([51]) : en effet, plus le volume ambiant de la chambre de combustion est grand, plus la couche limite qui s'établit au col de la tuyère est épaisse, offrant ainsi plus de résistance à la diffusion des espèces oxydantes.

1.2.2 Modèle pour le taux de récession de la paroi [52]

Keswani & Kuo ont développé un modèle théorique pour la récession du graphite, qui est basé sur les équations de conservation de l'écoulement gazeux turbulent dans la tuyère et sur l'équation non stationnaire de conduction de la chaleur pour le matériau [52]. Les prédictions de ce modèle sont en bon accord avec les résultats expérimentaux [51], [52].

Le taux de récession des parois de la tuyère dépend à la fois du taux de la cinétique chimique des réactions hétérogènes et du taux de diffusion des espèces oxydantes à la surface. Si les taux cinétiques sont très grands face aux taux de diffusion (cas où le nombre de Damköhler¹ est élevé), alors le taux de récession est guidé uniquement par le taux de diffusion des espèces oxydantes (et il est noté \dot{r}_d) : on parle alors de contrôle de l'ablation par la diffusion. A l'opposé, lorsque les taux de diffusion sont grands comparés aux taux cinétiques (cas où le nombre de Damköhler est petit), l'ablation est contrôlée par la cinétique chimique, et le taux de récession est noté \dot{r}_{ch} . Lorsque les taux de diffusion et les taux cinétiques sont du même ordre de grandeur (mécanisme de double contrôle de l'ablation), le taux de récession \dot{r} peut se calculer par la formule :

$$\dot{r} = \left(\frac{1}{\dot{r}_d} + \frac{1}{\dot{r}_{ch}} \right)^{-1} \quad (1.1)$$

La formule (1.1) constitue une excellente approximation du taux de récession pour la cinétique à l'ordre un [51]. Elle exprime que c'est le taux le plus petit qui contrôle le taux de récession (c'est analogue à ce qui se passe pour une flamme de diffusion dont la consommation est pilotée par le plus lent des phénomènes de diffusion et de réaction chimique).

¹Le nombre de Damköhler s'exprime comme le rapport d'un temps caractéristique pour les réactions chimiques à un temps caractéristique pour la dynamique de l'écoulement. Pour un volume de contrôle donné, ce nombre compare le temps nécessaire pour qu'une réaction chimique ait lieu au temps nécessaire à la convection d'une particule à travers le volume de contrôle. Des valeurs élevées du nombre de Damköhler impliquent que l'écoulement est gelé. A l'opposé, des nombres de Damköhler très petits devant l'unité indiquent que le système chimique va tendre vers l'équilibre dans un volume de contrôle.

La variable \dot{r}_d dépend des gradients de concentration des espèces oxydantes à la paroi, et de la densité des gaz à la paroi. Ces paramètres sont influencés par la pression de la chambre de combustion, la concentration des espèces oxydantes dans la région centrale, la rugosité des parois de la tuyère et le niveau de turbulence dans l'écoulement de cisaillement. La variable \dot{r}_d s'obtient grâce à la résolution des équations de conservation de la phase gazeuse [52].

La variable \dot{r}_{ch} dépend quant à elle des constantes cinétiques des réactions hétérogènes, de la concentration des différents réactants ainsi que de la température des parois de la tuyère. La résolution de l'équation non stationnaire de conduction de la chaleur dans la matériau graphitique fournit la température de paroi, et permet ainsi de calculer \dot{r}_{ch} [52].

La figure 1.1 illustre le couplage entre les équations pour la phase gazeuse et l'équation pour la phase solide dans le modèle proposé par *Keswani & Kuo* [52]. La variable v_w du croquis de la figure 1.1 désigne la vitesse radiale prise à la paroi, pour la phase gazeuse.

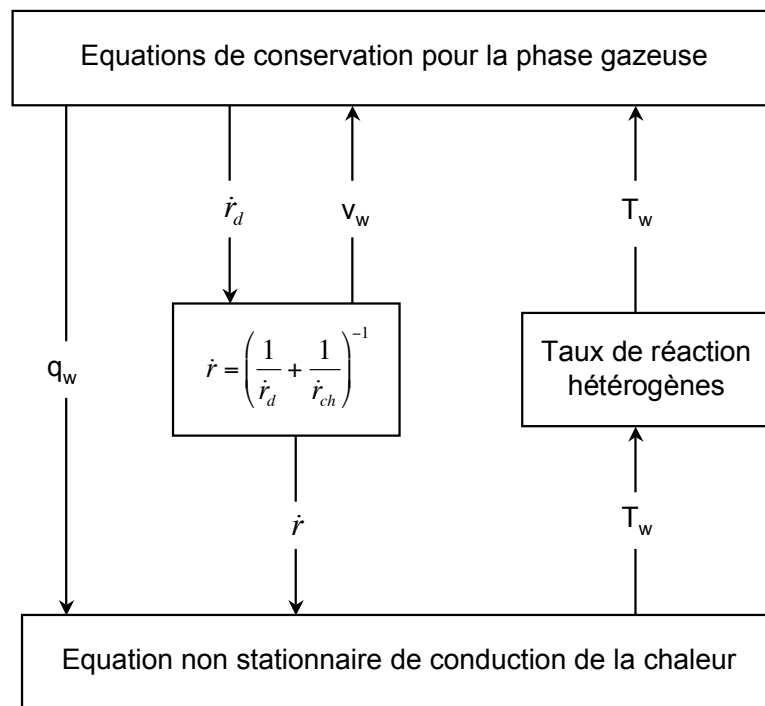


Fig. 1.1: Couplage entre la phase gazeuse et la phase solide, dans le modèle du taux de récession de la paroi proposé par *Keswani & Kuo* [52]

1.3 Bilans massique et énergétique de surface

L'ablation thermochimique des surfaces carbonées doit être traitée à l'aide d'un modèle de système ouvert car dans un volume de contrôle attaché à la surface, la composition en

termes d'atomes dépend des phénomènes de transport dans la couche limite et du taux de dégradation du matériau de surface.

Indices relatifs à la section 1.3 :

c	matériau carboné ou solide
e	évalué sur le bord extérieur de la couche limite
g	gaz de pyrolyse
i	espèce gazeuse
j	espèce gazeuse
k	atome
l	phase condensée
r	matière arrachée (érosion mécanique)

1.3.1 Bilan massique de surface

La fraction massique totale \tilde{Y}_k de l'atome k , indépendamment de sa configuration moléculaire, est définie par :

$$\tilde{Y}_k = \sum_i \alpha_{k,i} Y_i \quad (1.2)$$

où $\alpha_{k,i}$ est la fraction massique de l'atome k dans l'espèce i .

Par exemple, la fraction massique de l'atome de carbone C dans CO_2 est donnée par $\alpha_{C,CO_2} = \frac{0.012}{0.012+2 \times 0.016}$.

L'équilibre massique en termes d'atomes à la surface d'un matériau carboné qui est ablaté s'obtient en exigeant la conservation des atomes à la surface. Cela se traduit par la relation [50], [59] :

$$\dot{m}_c \tilde{Y}_{k,c} + \dot{m}_g \tilde{Y}_{k,g} = \tilde{j}_{k,w} + \rho_w V_{inj} \tilde{Y}_{k,w} + \dot{m}_r \tilde{Y}_{k,r} \quad (1.3)$$

où \dot{m} est un débit exprimé en $\text{kg}/(\text{m}^2 \cdot \text{s})$, V_{inj} la vitesse d'injection dans la couche limite gazeuse et $\tilde{j}_{k,w}$ le flux de diffusion de l'atome k indépendamment de sa configuration moléculaire.

Le croquis de la figure 1.2 illustre les différents flux d'atome à la surface d'un matériau ablatif de protection thermique interne [50]. Ce type de protection thermique n'est pas uniquement constitué de carbone : en effet, il s'agit d'un matériau composite² comportant du carbone, tel le carbone phénolique ou les composites au carbure de silicium. L'ablation des matériaux composites à base de carbone est plus complexe que l'ablation du carbone,

²Un composite, ou matériau composite, est constitué d'au moins deux matériaux non miscibles. Le nouveau matériau ainsi fabriqué possède des propriétés que les matériaux pris séparément ne possèdent pas. Il est composé d'une ossature, appelée renfort, qui assure la tenue mécanique, et d'une protection, appelée matrice, qui est généralement une matière plastique (résine thermoplastique ou thermodurcissable) et qui assure la cohésion de la structure et la retransmission des efforts vers le renfort.

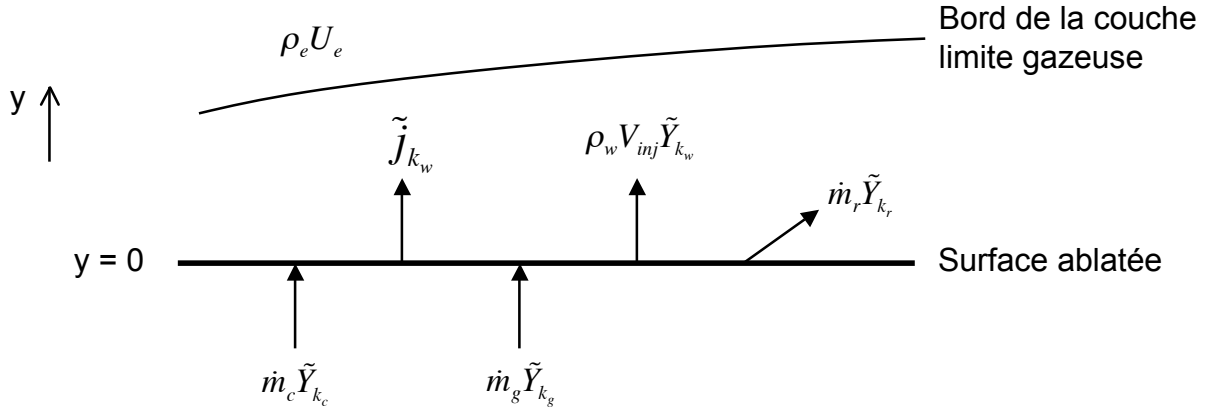


Fig. 1.2: Flux de masse en termes d'atomes à la surface d'un matériau carboné soumis à de l'ablation

car leur décomposition chimique sous l'effet de l'ablation se produit par couches successives. Pour simuler une telle ablation, il est nécessaire de coupler le calcul du fluide au calcul de la structure, ce dernier prenant en compte la manière dont est dégradée la paroi.

Dans l'équation (1.3), on ne connaît pas le flux de diffusion de l'atome k à la paroi $\tilde{j}_{k,w}$. Ce flux doit être modélisé grâce à des données extérieures. Un modèle souvent utilisé par Snecma Propulsion Solide sera confronté aux données DNS dans la sous-section 2.4.4.

1.3.2 Bilan énergétique de surface

Le croquis de la figure 1.3 illustre les différents flux intervenant dans le bilan énergétique à la surface d'un matériau ablatif de protection thermique interne [50].

A la surface d'un matériau carboné qui est ablaté, la conservation de l'énergie en surface s'exprime par la relation [50] :

$$\lambda_g \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_w - \sum_i j_{i,w} \Delta h_i^0 = \rho_w V_{inj} h_w + \dot{m}_r h_r + \lambda_c \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_w - \alpha_w q_r + \sigma \epsilon_w T_w^4 - \dot{m}_g h_g - \dot{m}_c h_c \quad (1.4)$$

avec

- V_{inj} la vitesse d'injection dans la couche limite gazeuse ;
- $j_{i,w}$ le flux de diffusion de l'espèce i , à la paroi ;
- $h_{s,w}$ l'enthalpie sensible à la paroi ;
- α_w la diffusivité thermique à la paroi ;
- q_r le flux de chaleur radiatif incident ;
- σ la constante de Stefan-Boltzmann ;
- ϵ_w l'émissivité à la paroi ;
- Δh_i^0 l'enthalpie de formation de l'espèce i à la température de référence T_0 .

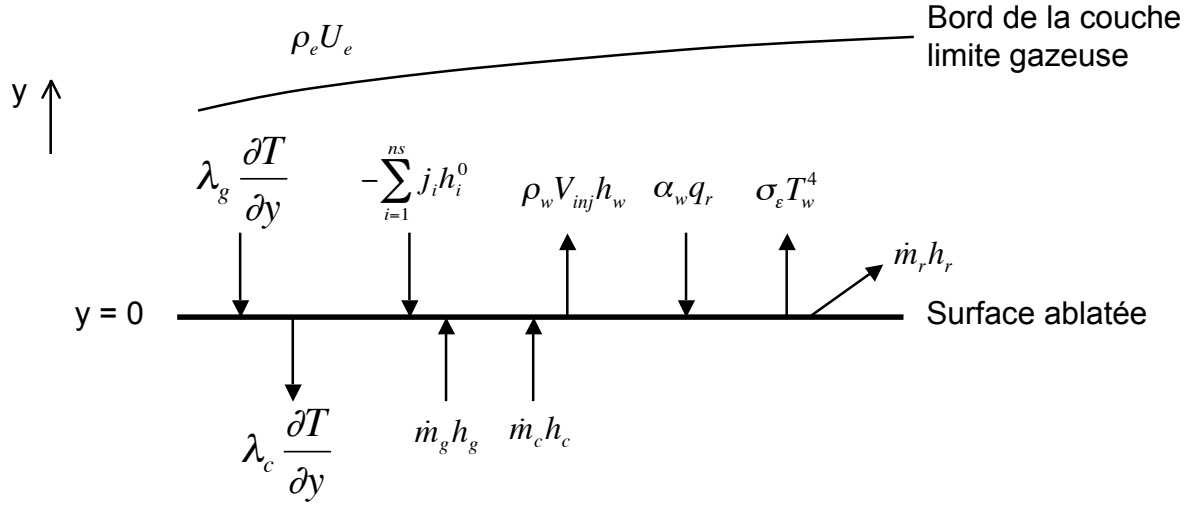


Fig. 1.3: Flux d'énergie à la surface d'un matériau carboné soumis à de l'ablation

Le terme $\lambda_g \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_w - \sum_i j_{i,w} h_i^0$ de l'équation (1.4) n'est pas connu et doit donc être modélisé.

A la sous-section 2.4.5, le modèle utilisé par Snecma Propulsion Solide sera comparé aux données issues de la DNS.

Notons que l'équation (1.4) s'applique aussi à un matériau homogène : le débit des gaz de pyrolyse en profondeur \dot{m}_g est alors nul, et le taux de récession du carbone, \dot{m}_c , est remplacé par le taux d'ablation du matériau homogène.

1.4 Adaptation du code de calcul AVBP

L'ablation des parois nécessite du point de vue numérique un traitement particulier. Cette section s'attache à décrire la chimie de surface, la condition limite qui reproduit le phénomène d'ablation, ainsi que son implémentation dans le code AVBP.

1.4.1 Description de la chimie en surface

La formule du taux de réaction massique $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k donnée à la section 4.5 du chapitre 4 de la partie I s'applique au taux de production surfacique \dot{s}_i de l'espèce i : il suffit juste de remplacer $\dot{\omega}_k$ par \dot{s}_i .

De même, l'expression du taux de progression de la réaction chimique reste inchangée (il est donné par la formule (4.34) de la section 4.5 du chapitre 4 de la partie I), et les constantes $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont fournies respectivement par les formules (4.35) et (4.36) (section 4.5 du chapitre 4 de la partie I) lorsqu'elles sont modélisées par la loi d'Arrhénius. La constante

d'équilibre K_{eq} est donnée par une relation similaire à celle indiquée à la sous-section 4.5.1 de la partie I ([15]).

Dans la présente étude et en accord avec Snecma Propulsion Solide, une seule réaction chimique surfacique a été retenue, car considérée comme prépondérante :



Le taux de production surfacique de l'espèce i (exprimé en $\text{kg}/\text{m}^2/\text{s}$) s'écrit alors simplement

$$\dot{s}_i = \nu_i W_i \dot{s} \quad (1.6)$$

où \dot{s} désigne le taux d'avancement de la réaction d'ablation, et où les coefficients stœchiométriques ν_i sont égaux à 1 pour CO et H_2 , et à -1 pour H_2O .

En utilisant la loi d'Arrhénius, le taux d'avancement de la réaction d'ablation \dot{s} (exprimé en $\text{mol}/\text{m}^2/\text{s}$) est donné par la formule suivante :

$$\dot{s} = \rho \frac{Y_{H_2O}}{W_{H_2O}} A T_w^\beta \exp\left(\frac{-E_{act}}{RT_w}\right) \quad (1.7)$$

La température de paroi T_w étant connue, le taux d'avancement de la réaction d'ablation \dot{s} peut s'écrire sous la forme

$$\dot{s} = \rho \frac{Y_{H_2O}}{W_{H_2O}} \times \text{constante} \quad (1.8)$$

et on constate que le taux d'avancement de la réaction d'ablation \dot{s} est piloté par la fraction massique d'eau.

La constante de l'équation (1.8) a été fixée de sorte que la DNS reproduise une vitesse d'injection V_{inj} conforme à celle estimée dans la tuyère de Snecma Propulsion Solide. Plus précisément, nous nous sommes attachés à reproduire la vitesse d'injection adimensionnée V_{inj}^+ définie par :

$$V_{inj}^+ = \frac{V_{inj}}{u_\tau} \quad (1.9)$$

V_{inj}^+ est en effet le paramètre qui mesure l'effet du soufflage sur l'écoulement pariétal [93], et il est donc essentiel qu'il soit reproduit dans la DNS avec ablation. Dans le cas présent, V_{inj}^+ est de l'ordre de 4×10^{-3} et une valeur proche de 0.013 pour la constante de la relation (1.8) s'est avérée nécessaire.

1.4.2 Condition limite d'ablation

Nous avons à présent tous les ingrédients nécessaires à l'écriture de la condition limite d'ablation.

Pour chaque espèce i du mélange, la conservation de la masse en surface s'exprime par la relation

$$\rho_w Y_{w,i} (V_{inj} + V_i^n) = \dot{s}_i \quad (1.10)$$

où V_i^n représente la composante normale entrante de la vitesse de diffusion de l'espèce i et V_{inj} la composante normale de la vitesse du mélange, étant entendu que \dot{s}_i est nul pour les espèces ne réagissant pas en surface.

La relation (1.10) est une adaptation à notre cas de l'équation (1.3) :

- les termes $\dot{m}_c \tilde{Y}_{k,c}$ et $\dot{m}_g \tilde{Y}_{k,g}$ sont ici nuls car la surface ablatée n'est constituée que de carbone et il n'y a donc pas de flux de masse provenant de l'intérieur du matériau ;
- il n'y a pas d'arrachement de matière par érosion mécanique, donc le terme $\dot{m}_r \tilde{Y}_{k,r}$ est nul ;
- l'équation (1.10) étant écrite pour des espèces, et non des atomes, elle comporte un terme de production surfacique \dot{s}_i pour chaque espèce i .

Etant donné que $\sum_i \rho Y_i V_i^n = 0$, la vitesse de soufflage V_{inj} est définie par la formule :

$$V_{inj} = \frac{1}{\rho} \sum_i \dot{s}_i \quad (1.11)$$

Les vitesses de diffusion sont modélisées par l'approximation de Hirschfelder-Curtiss avec vitesse de correction, qui, rappelons-le, constitue la meilleure approximation au premier ordre de la vitesse de diffusion. Le flux de diffusion de l'espèce i dans la direction n s'écrit alors

$$Y_i V_i^n = -\frac{W_i}{\bar{W}} D_{i,mix} \nabla_n X_i + Y_i V_{cor}^n \quad (1.12)$$

où ∇_n désigne le gradient dans la direction normale et où la vitesse de correction dans la direction normale V_{cor}^n est définie par

$$V_{cor}^n = \frac{1}{\bar{W}} \sum_i D_{i,mix} W_i \nabla_n X_i \quad (1.13)$$

Finalement, le bilan de masse en surface s'écrit

$$-D_{i,mix} \nabla_n Y_i + Y_i \left(V_{inj} + V_{cor}^n + \bar{W} D_{i,mix} \sum_j \frac{\nabla_n Y_j}{W_j} \right) = \frac{\dot{s}_i}{\rho} \quad (1.14)$$

sachant que

$$\nabla_n X_i = \frac{\bar{W}}{W_i} \nabla_n Y_i - \frac{\bar{W}^2}{W_i} Y_i \sum_j \frac{\nabla_n Y_j}{W_j} \quad (1.15)$$

La relation (1.14) permet d'imposer faiblement le gradient de l'espèce i à la paroi isotherme et constitue la condition limite à prescrire pour l'espèce i .

La condition limite pour l'équation de l'énergie reste $T = T_w$.

Pour la composante normale de la quantité de mouvement, il faut imposer le débit normal d'injection $\rho V_{inj} = \sum_i \dot{s}_i$, tandis qu'on applique une condition classique de non-glissement pour la composante tangentielle.

1.4.3 Implémentation de la condition limite d'ablation dans AVBP

Rappelons qu'il existe deux manières d'imposer une condition limite :

1. **condition limite imposée fortement** : connaissant la solution w^n à l'instant n , l'application du schéma numérique fournit une solution w^p (solution "prédite" par le schéma numérique) en chaque nœud du maillage, sans faire distinction entre les nœuds de bord et les nœuds intérieurs au domaine. Puis, pour chaque nœud appartenant au bord du domaine de calcul, la valeur w^p est remplacée par la valeur donnée par la condition limite, cette dernière constituant la solution w^{n+1} à l'instant $n + 1$ pour les nœuds de bord. Pour les nœuds intérieurs au domaine de calcul, on a : $w^{n+1} = w^p$;
2. **condition limite imposée faiblement** : cette approche est utilisée conjointement avec l'approche décrite à l'item 1, et elle est principalement employée pour les conditions limites de type "Neumann", telles l'adiabaticité ou la perméabilité. Il s'agit ici d'imposer des contraintes sur les flux visqueux : cela peut être fait de manière indirecte en agissant sur les gradients, ou de manière directe en agissant sur les flux. Quoiqu'il en soit, ces modifications doivent être effectuées avant d'appliquer le schéma numérique. Des conditions limites additionnelles de type "Dirichlet" peuvent être appliquées par la suite.

La condition limite d'ablation implémentée dans le code de calcul AVBP est une condition limite "faible" de mur isotherme non glissant ayant un flux d'espèce normal à la paroi non nul.

A chaque itération temporelle :

- on utilise la relation (1.14) pour prescrire le gradient d'espèce normal à la paroi ;
- on impose à l'équation de l'énergie de vérifier $T = T_w$ au mur ;
- pour la quantité de mouvement, on impose le débit normal d'injection (à savoir $\rho V_{\text{inj}} = \sum_i \dot{s}_i$), et une condition de non-glissement pour la composante tangentielle ($\rho u = 0$).

Chapitre 2

DNS en mélange multi-espèce réactif et parois ablatées

Dans les chapitres de la partie II, les parois ont été considérées comme imperméables et inertes. A présent, l'ablation des parois en carbone va être prise en compte dans la DNS de façon à connaître son effet sur le flux de chaleur. Les données générées par la DNS avec ablation vont permettre de tester les corrélations qu'utilise Snecma Propulsion Solide pour calculer les flux d'espèce pariétaux et le flux de chaleur pariétal.

La DNS présentée dans ce chapitre utilise la même configuration que la DNS de canal en mélange multi-espèce réactif et parois inertes. Seules diffèrent la solution initiale (qui est une solution ayant atteint un état convergé dans la DNS en parois inertes avec mélange équivalent réactif) et la condition limite appliquée aux murs.

2.1 Prise en compte de l'effet de soufflage

Si l'on considère que la dégradation de la paroi en carbone se fait avec une vitesse d'ablation V_{ab} , le débit massique de gaz injecté est simplement

$$\dot{m}_{gaz} = \rho_c V_{ab} \quad (2.1)$$

où ρ_c est la masse volumique de la paroi solide en carbone. Ce débit peut encore s'écrire à partir de la masse volumique des gaz injectés ρ_{inj} et de la vitesse d'injection V_{inj} comme :

$$\dot{m}_{gaz} = \rho_{inj} V_{inj} \quad (2.2)$$

La masse de gaz injectée par les deux murs dans le domaine de calcul (canal plan 3D de dimensions L_x , $2h$ et L_z) en une seconde est alors égale à :

$$M_{inj} = 2\dot{m}_{gaz} L_x L_z \quad (2.3)$$

La masse de gaz initialement contenue dans le domaine de simulation est quant à elle

$$M_{gaz} = 2h L_x L_z \rho_{gaz} \quad (2.4)$$

où ρ_{gaz} est la masse volumique moyenne du mélange dans le canal. Pour un temps physique simulé égal à τ_{simul} , la variation de masse contenue par le domaine de calcul (supposé périodique en x et z) est donc égale à :

$$\frac{\Delta M}{M_{\text{gaz}}} = \frac{M_{\text{inj}} \tau_{\text{simul}}}{M_{\text{gaz}}} = \frac{\rho_{\text{inj}} V_{\text{inj}} \tau_{\text{simul}}}{h \rho_{\text{gaz}}} \quad (2.5)$$

Pour un temps physique simulé de l'ordre de 10 temps de diffusion turbulente h/u_τ (qui permet d'obtenir des statistiques suffisamment convergées), on obtient l'estimation :

$$\frac{\Delta M}{M_{\text{gaz}}} \simeq 10 \frac{\rho_{\text{inj}}}{\rho_{\text{gaz}}} V_{\text{inj}}^+ \quad (2.6)$$

En faisant l'hypothèse que le rapport des masses volumiques n'est pas très éloigné de l'unité (ce qui est le cas dans notre DNS), on trouve que l'augmentation relative de masse dans le domaine est grossièrement :

$$\frac{\Delta M}{M_{\text{gaz}}} \simeq 10 V_{\text{inj}}^+ \quad (2.7)$$

Les calculs de couche limite effectués par Snecma Propulsion Solide donnent une vitesse de frottement u_τ d'environ 11.5 m/s . D'autre part, d'après les données thermo-ablatives fournies par Snecma Propulsion Solide, la vitesse d'injection dans le convergent de la tuyère vaut environ 0.0424 m/s . Cela conduit à

$$V_{\text{inj}}^+ = 0.0037 \quad (2.8)$$

ce qui représente un faible niveau de soufflage.

Deux stratégies peuvent être envisagées vis-à-vis de l'augmentation de la masse contenue dans le canal :

1. ajouter un terme source $S_i = - \langle \dot{s}_i \rangle / h$ à l'équation de conservation de chaque espèce i impliquée dans la réaction d'ablation, pour contrer l'augmentation de la masse contenue dans le canal ($\langle \rangle$ représente la valeur moyenne sur les parois réactives) ;
2. laisser les équations en l'état : on obtient alors des statistiques un peu bruitées, mais on résout les vraies équations.

Au vue de la valeur de V_{inj}^+ , on s'attend à une faible augmentation de la masse contenue dans le canal. Cette estimation est corroborée par la figure 2.1 qui montre les évolutions temporelles des pressions, températures et densités minimales, moyennes et maximales dans le canal. La faible augmentation de la masse contenue dans le canal justifie qu'aucun terme source S_i ne soit utilisé dans cette DNS.

2.2 Modification du domaine de simulation

Pendant la durée de la simulation, la paroi se rétracte d'une longueur $\Delta h = V_{\text{ab}} \tau_{\text{simul}}$, si bien que la variation relative de la hauteur du canal est donnée par (en prenant la même

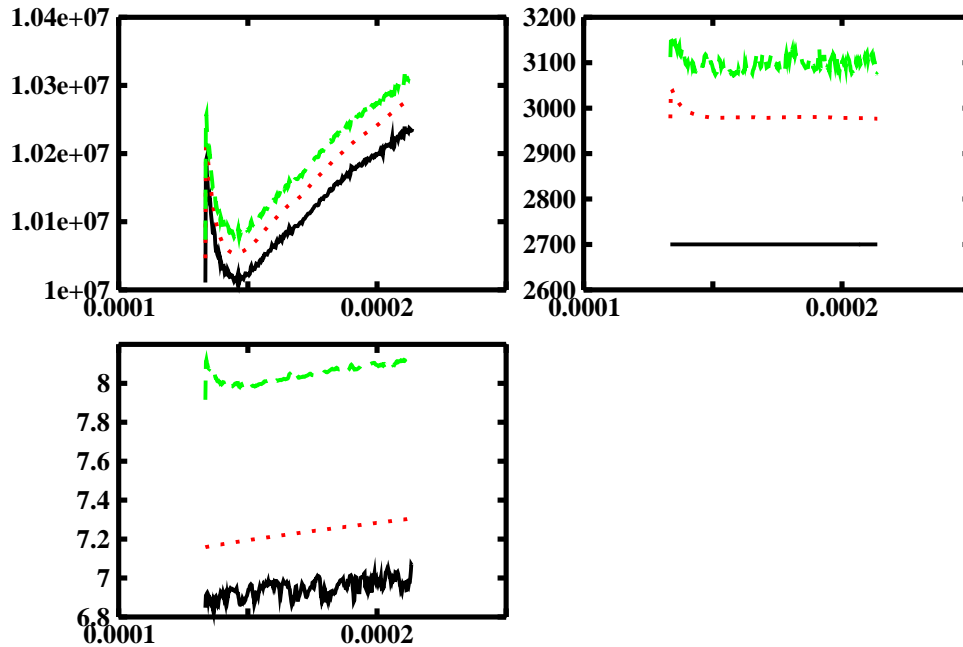


Fig. 2.1: Evolutions temporelles (en secondes) des pressions (en Pa), températures (en K) et densités (en kg/m^3) minimales, moyennes et maximales dans la DNS avec ablation. — : valeur minimale; ... : valeur moyenne; - - - : valeur maximale

estimation du temps physique simulé que précédemment) :

$$\frac{\Delta h}{h} \simeq 10V_{\text{ab}}^+ = 10\frac{\rho_{\text{inj}}}{\rho_c}V_{\text{inj}}^+ \quad (2.9)$$

où le rapport $\frac{\rho_{\text{inj}}}{\rho_c}$ est de l'ordre de $6/2000$. Finalement la variation de la taille (hauteur) du domaine de calcul est de l'ordre de $0.03V_{\text{inj}}^+$, donc négligeable y compris pour de forts niveaux de soufflage ($V_{\text{inj}}^+ = 1$). Par conséquent, on pourra considérer que le domaine de calcul est fixe pendant la simulation.

2.3 Evolutions temporelles

La DNS dont les résultats sont présentés ici a duré quinze temps de diffusion turbulente. Suite à la modélisation de l'ablation des parois en carbone par la réaction chimique de surface $C + H_2O \rightarrow CO + H_2$, les fractions massiques de CO et de H_2 au mur augmentent,

tandis que celle de H_2O diminue. C'est ce que montrent les figures 2.2, 2.3 et 2.4.

La figure 2.5 montre qu'on a la bonne vitesse d'injection car elle est de l'ordre de 4 cm/s au début du calcul (valeur en accord avec les données fournies par Snecma Propulsion Solide sur l'ablation dans le convergent, cf section 2.1). Sa décroissance avec le temps est directement liée à l'appauvrissement en eau à la paroi.

Contrairement à la DNS en parois inertes, aucun état d'équilibre ne sera atteint car le milieu ne cesse de s'appauvrir en eau. Ceci rend impossible toute accumulation temporelle. Par conséquent, les profils seront forcément plus bruités (par manque de convergence), mais certainement suffisants pour visualiser les phénomènes du premier ordre liés à l'ablation de la paroi et tester les hypothèses de modélisation faites dans le code THERMO [3].

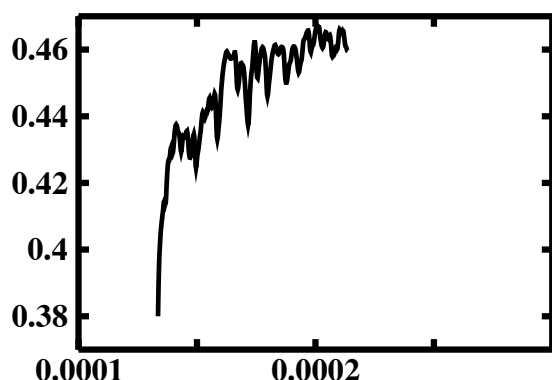


Fig. 2.2: Evolution temporelle (en secondes) de la fraction massique de CO au mur

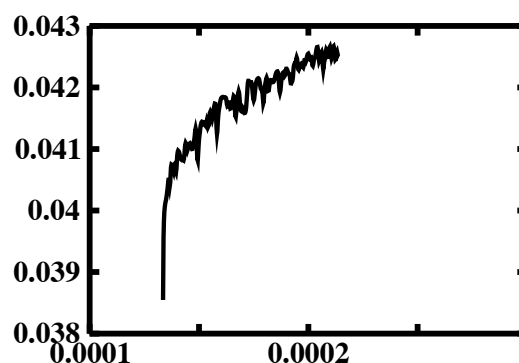


Fig. 2.3: Evolution temporelle (en secondes) de la fraction massique de H_2 au mur

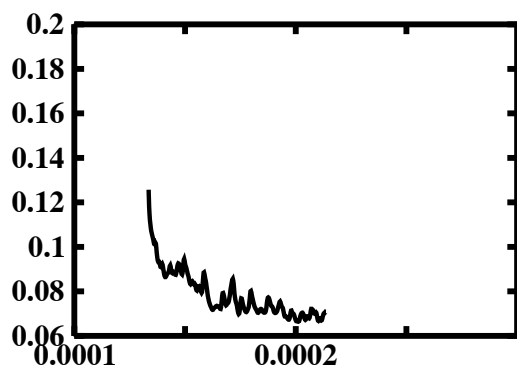


Fig. 2.4: Evolution temporelle (en secondes) de la fraction massique de H_2O au mur

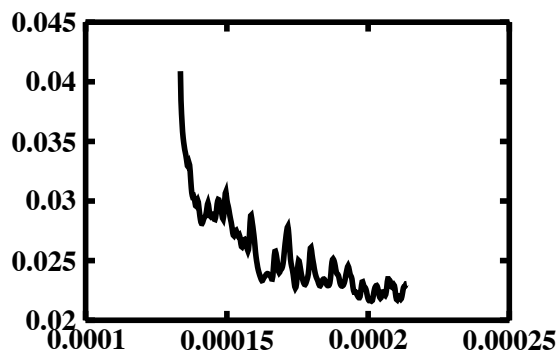


Fig. 2.5: Evolution temporelle (en secondes) de la vitesse d'ablation en m/s

La figure 2.6 montre les profils du rapport $Y_{H_2O}/Y_{H_2O,e}$ à différentes étapes de la DNS. La valeur $Y_{H_2O,e}$ est celle au centre du canal. On remarque que la forme du profil de concentration en eau change peu après 5 temps de diffusion turbulente. La forme obtenue

est par ailleurs en bon accord avec [52]. Enfin, la concentration pariétale en eau se stabilise aux alentours de 70% de sa valeur au centre du canal, ce qui indique que l'ablation est pilotée à la fois par la diffusion et par la cinétique chimique.

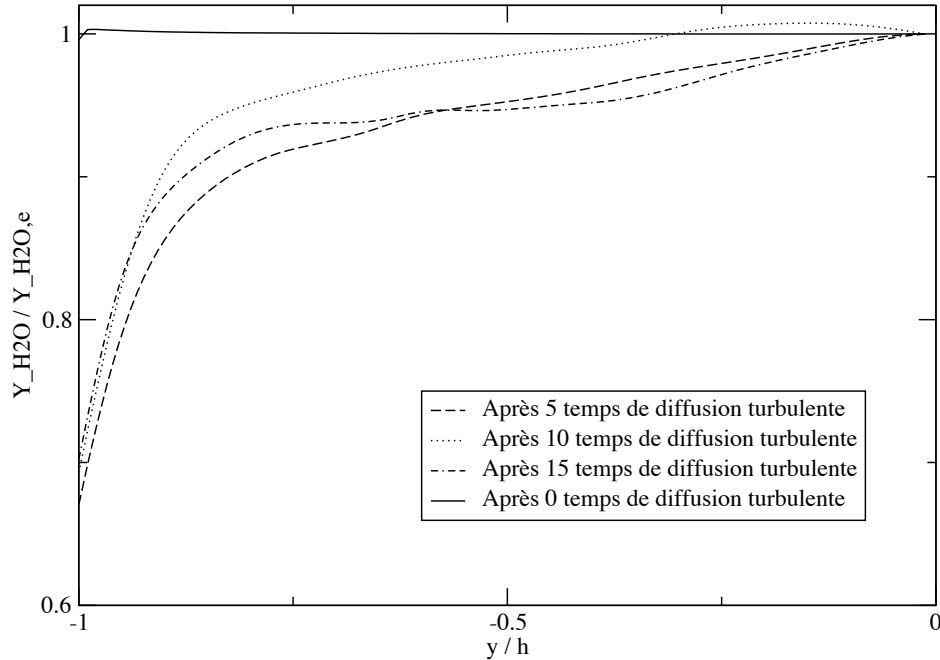


Fig. 2.6: Profils moyens de Y_{H_2O} normés par $Y_{H_2O,e}$, à divers temps de la DNS à $Re_\tau = 180$ (demi-canal inférieur)

2.4 Exploitation des résultats de la DNS

2.4.1 Bilan énergétique

Comme on l'a montré dans le cas où les parois sont inertes, il faut formuler le bilan d'énergie avec l'enthalpie totale chimique h_t . Pour rappel, l'équation de conservation de l'enthalpie totale chimique s'écrit

$$\frac{\partial \rho h_t}{\partial t} + \frac{\partial U_j h_t}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} - \sum_{k=1}^{ns} \rho Y_k V_j^k h_k \right) + \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial \tau_{ij} U_i}{\partial x_j} + S_{\text{DNS}} \quad (2.10)$$

avec le vecteur vitesse de composantes $(U_j)_{j=1,3} = (u, v, w)$.

Etant donné qu'aucun état d'équilibre ne peut être atteint dans la DNS avec ablation du fait de l'appauvrissement du milieu en eau, moyenniser en temps n'est pas correct. Il faudrait réaliser une moyenne d'ensemble sur plusieurs échantillons : cela nécessite de réaliser plusieurs DNS avec ablation de la même configuration, avec les mêmes paramètres

(en particulier le même V_{inj}^+), mais en faisant varier la solution initiale. 133 heures de calculs sur seize processeurs de la machine SGI Origin 3800 du CINES¹ sont nécessaires pour simuler quinze temps de diffusion turbulente lorsque les parois en carbone sont ablatées. Comme nous ne disposons plus de suffisamment de temps pour effectuer plusieurs de ces DNS, les profils que nous allons montrer seront un peu bruités (car ils sont issus d'une seule et même DNS avec ablation). Cela constitue une première étape dans l'exploitation des résultats issus de la DNS avec ablation.

Moyenner l'équation (2.10) suivant les directions longitudinale x et transverse z conduit à :

$$\frac{\partial \overline{\rho h_t}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\overline{\rho v h_t} - \lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \sum_{k=1}^{ns} \overline{\rho Y_k V_2^k h_k} \right) = S_{\text{DNS}} \quad (2.11)$$

Entre cinq et quinze temps de diffusion turbulente, le terme $\partial \overline{\rho h_t} / \partial t$ de l'équation (2.11) peut être négligé dans une première approximation, car à la paroi, il est environ cent fois plus petit que le terme source S_{DNS} .

Du fait de l'ablation des parois, la vitesse normale au mur v n'est pas nulle. Par conséquent, on a :

$$\overline{\rho v} \neq 0 \quad \text{et} \quad \tilde{v} \neq 0 \quad (2.12)$$

Décomposons le terme $\overline{\rho v h_t}$:

$$\overline{\rho v h_t} \equiv \overline{\rho} \widetilde{v h_t} = \overline{\rho} (\tilde{v} \tilde{h}_t + v'' \tilde{h}_t'') \quad (2.13)$$

L'ablation des parois introduit donc dans le bilan énergétique un terme supplémentaire $\overline{\rho} \tilde{v} \tilde{h}_t$ (par rapport au cas avec parois inertes) dont il va falloir tenir compte.

L'enthalpie totale chimique est la somme de trois contributions : l'enthalpie sensible, l'enthalpie chimique et l'enthalpie cinétique. Etant donné qu'on travaille à Mach faible ($\text{Ma} = 0.2$), la partie cinétique est négligeable, et alors :

$$h_t \simeq \int_{T_0}^T C_p dT + \sum_{k=1}^{ns} Y_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.14)$$

Le terme $\overline{\rho} \tilde{v} \tilde{h}_t$ est approché par (hypothèse de $\overline{C_p}$ constant car la DNS montre qu'il varie très peu) :

$$\overline{\rho} \tilde{v} \tilde{h}_t \simeq \overline{\rho} \overline{C_p} \tilde{v} \tilde{T} + \overline{\rho} \sum_{k=1}^{ns} \tilde{v} \tilde{Y}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.15)$$

Le premier terme de l'équation (2.15) provient de la partie sensible de l'enthalpie, tandis que le second est issu de la partie chimique.

Les autres termes de l'équation (2.11) sont modélisés de la même manière que dans le cas des parois inertes.

Grâce à la DNS, on peut connaître la valeur numérique de chacun des termes du bilan énergétique moyen (*cf* figures 2.7 et 2.8) et voir ainsi quels sont les effets prépondérants dans la zone turbulente, et en proche paroi.

¹Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur

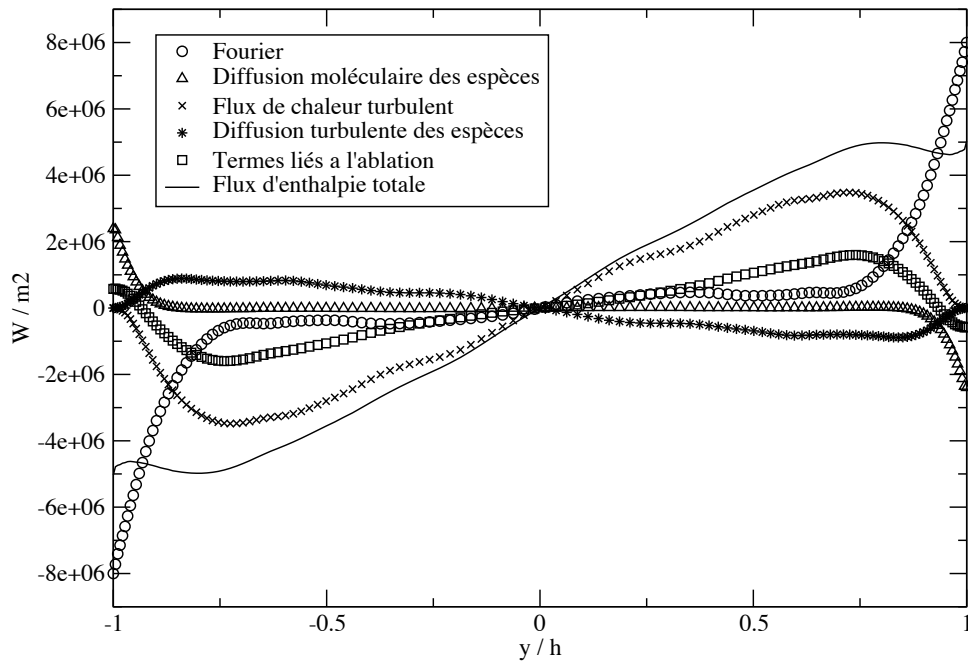


Fig. 2.7: Flux d'enthalpie totale après cinq temps de diffusion turbulente ($Re_\tau = 180$)

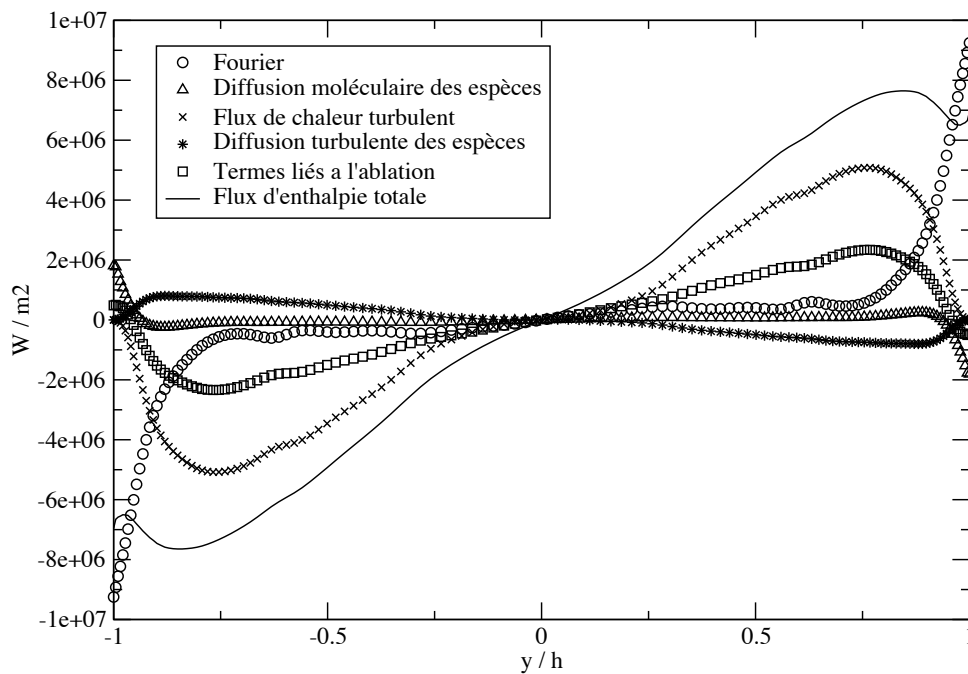


Fig. 2.8: Flux d'enthalpie totale après quinze temps de diffusion turbulente ($Re_\tau = 180$)

Les graphiques des figures 2.7 et 2.8 montrent que la situation est globalement la même après avoir simulé 5 ou 15 temps de diffusion turbulente. Par ailleurs, on note que les termes dûs à l'ablation des parois ne peuvent pas être négligés. La modification de la composition du mélange induite par l'ablation du carbone est telle que le terme de diffusion turbulente des espèces change de signe par rapport à la situation en parois inertes. Les termes liés à la présence d'une vitesse d'injection sont quant à eux du même signe que le flux de chaleur turbulent, et au final le flux de chaleur total reste du même ordre de grandeur que dans le cas inerte.

2.4.2 Profils de température et de vitesse

Profil de température

Les graphiques des figures 2.9 et 2.10 comparent le profil de température adimensionnée donné par différentes lois de paroi à celui issu de la DNS avec ablation après cinq, puis quinze, temps de diffusion turbulente. Après quinze temps de diffusion turbulente, on constate que la loi de paroi couplée vitesse-température avec chimie permet de reproduire les résultats de la DNS avec ablation, contrairement aux lois LMF et LMF-Pr. Par contre, après cinq temps de diffusion turbulente, aucune de ces trois lois ne fournit des résultats satisfaisants, bien que la loi couplée vitesse-température avec chimie soit la plus fidèle aux données issues la DNS. Bien entendu, on ne peut pas déduire de ces résultats que la loi développée en parois inertes est adaptée au cas des parois ablatées. Ils montrent simplement que pour le régime étudié, l'effet de l'ablation sur le flux de chaleur n'est pas énorme. Ceci est cohérent avec le fait que le paramètre d'injection V_{inj}^+ est faible (4×10^{-3}) dans le régime étudié.

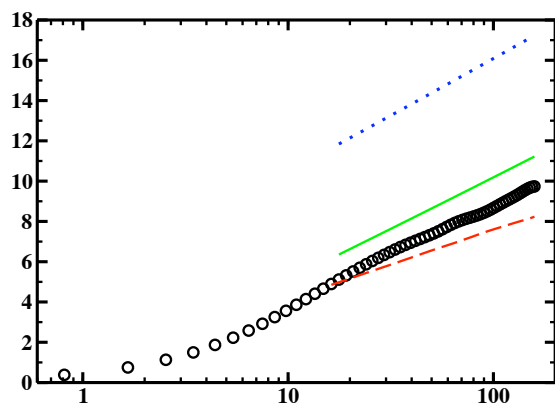


Fig. 2.9: Profils de température adimensionnée en fonction de y^+ , après cinq temps de diffusion turbulente ($Re_\tau = 180$). \circ : DNS ; - - - : Loi de paroi couplée avec chimie ; — : Loi LMF-Pr ; ... : Loi LMF

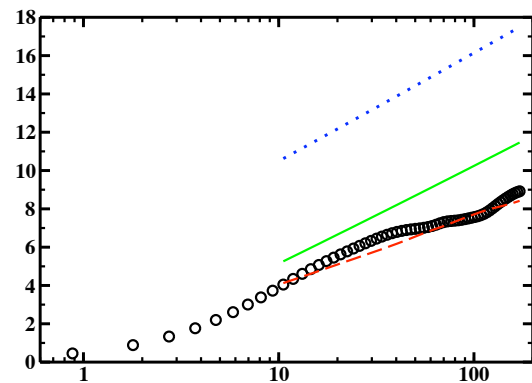


Fig. 2.10: Profils de température adimensionnée en fonction de y^+ , après quinze temps de diffusion turbulente ($Re_\tau = 180$). \circ : DNS ; - - - : Loi de paroi couplée avec chimie ; — : Loi LMF-Pr ; ... : Loi LMF

Profil de vitesse

Les profils de vitesse longitudinale u^+ après cinq et quinze temps de diffusion turbulente (figures 2.11 et 2.12 respectivement) confirment la faible sensibilité de la vitesse u^+ au phénomène d'ablation chimique des parois. Après cinq temps de diffusion turbulente, la loi couplée vitesse-température avec chimie, la loi LMF et la loi logarithmique arrivent à reproduire le profil de u^+ issu de la DNS avec des performances comparables. Cependant, après quinze temps de diffusion turbulente, la loi couplée vitesse-température avec chimie est la plus proche des données issues de la DNS.

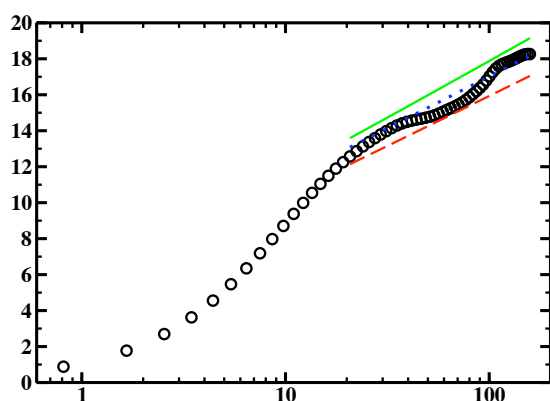


Fig. 2.11: Profils de vitesse adimensionnée en fonction de y^+ , après cinq temps de diffusion turbulente ($Re_\tau = 180$). \circ : DNS; --- : Loi de paroi couplée avec chimie; — : Loi LMF; ... : Loi logarithmique $u^+ = (1/\kappa)\ln(y^+) + 5.5$

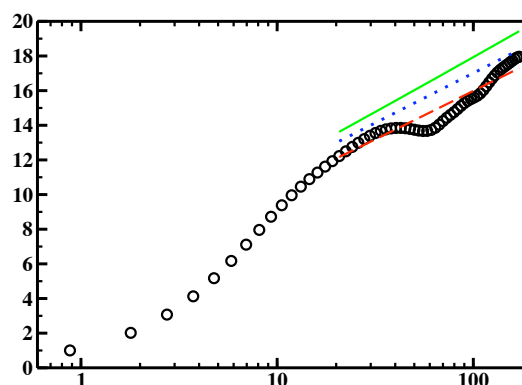


Fig. 2.12: Profils de vitesse adimensionnée en fonction de y^+ , après quinze temps de diffusion turbulente ($Re_\tau = 180$). \circ : DNS; --- : Loi de paroi couplée avec chimie; — : Loi LMF; ... : Loi logarithmique $u^+ = (1/\kappa)\ln(y^+) + 5.5$

2.4.3 Equilibre chimique

Dans la DNS avec parois inertes, la vérification de l'équilibre chimique est un point clé pour la dérivation de la loi de paroi. Si cette hypothèse était à nouveau vérifiée dans la DNS avec ablation, cela serait un avantage majeur dans la dérivation d'une loi de paroi spécifique à l'ablation.

Le graphique de la figure 2.13 compare les profils des fractions molaires des atomes de carbone, oxygène, hydrogène et azote, à divers stade de la DNS avec ablation, ainsi qu'à ceux de la DNS avec parois inertes. Cela montre que dans le cas avec ablation des parois en carbone, l'équilibre chimique ne peut pas s'écrire aussi simplement que dans le cas où les parois sont considérées inertes, car il ne peut plus se réduire à $X_i = X_i(T)$: en effet, il faut aussi donner la composition locale atomique. Une loi de paroi avec ablation doit donc coupler les évolutions pariétales de vitesse, température et fractions massiques atomiques. Dans le cas étudié où le nombre d'espèces atomiques est égal à quatre, cela conduirait à

un système de cinq équations : une pour la vitesse, une pour la température, trois pour les fractions atomiques (la quatrième se déduisant des trois premières par complément à l'unité).

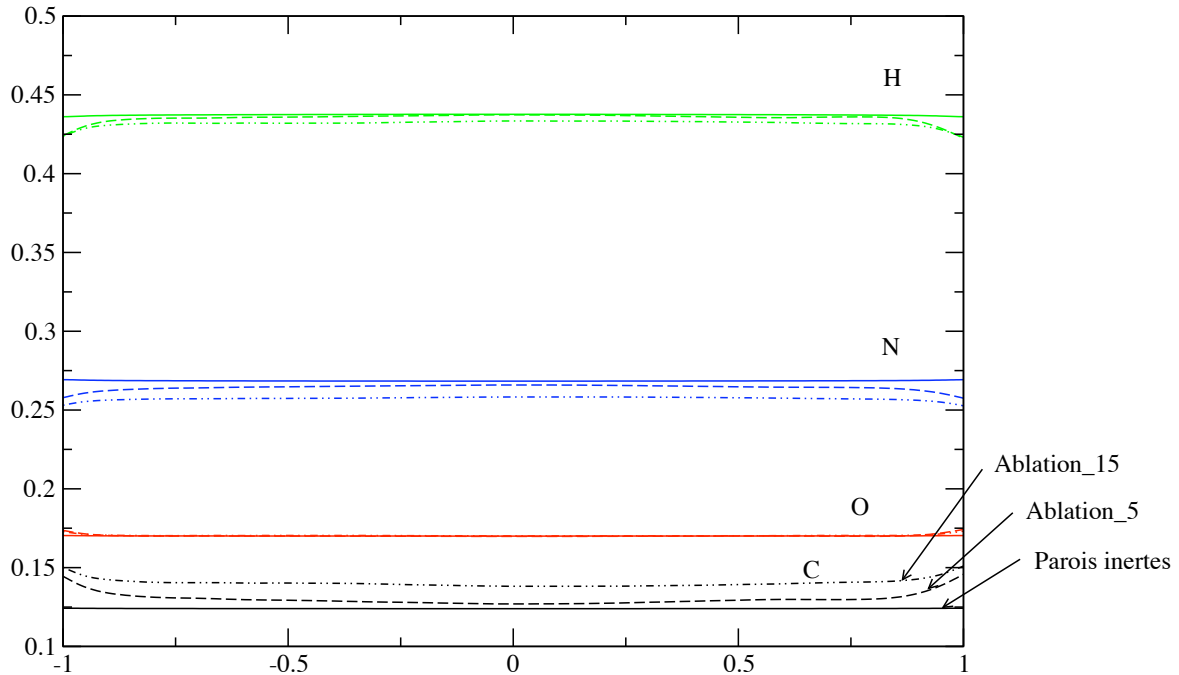


Fig. 2.13: Profils des fractions molaires des atomes de carbone, oxygène, hydrogène et azote. — : DNS avec parois inertes ; ... : DNS avec ablation, après 5 temps de diffusion turbulente ; -.- -.- : DNS avec ablation, après 15 temps de diffusion turbulente

2.4.4 Flux d'espèce à la paroi

Dans la chaîne de calculs de Snecma Propulsion Solide dédiée au dimensionnement thermique des tuyères, le module de thermochimie THERMO [3] assure le calcul des flux de diffusion.

Lorsque les coefficients de diffusion sont supposés égaux, le module THERMO calcule le flux pariétal de l'atome k , noté $\tilde{j}_{k,w}$, par la corrélation²

$$\tilde{j}_{k,w} = \rho_e u_e C_M (\tilde{Y}_{k,w} - \tilde{Y}_{k,e}) \quad (2.16)$$

tandis que dans le cas où les coefficients de diffusion sont supposés différents, il utilise la corrélation²

$$\tilde{j}_{k,w} = \rho_e u_e C_M (\tilde{Y}_{k,w}^* - \tilde{Y}_{k,e}^*) \quad (2.17)$$

²Manuel d'utilisation de THERMO [3]

Pour chaque atome k , la variable \tilde{Y}_k^* est définie par :

$$\tilde{Y}_k^* = \sum_i c_{k,i} Y_i^* \quad (2.18)$$

avec $c_{k,i}$ fraction atomique de l'atome k dans l'espèce i .

La fraction atomique de l'atome de carbone C dans CO_2 est donnée par $c_{C,CO_2} = \frac{1}{1+2}$.

La variable Y_i^* est définie par

$$Y_i^* = \frac{Z_i^\gamma Y_i^{1-\gamma}}{\sum_{i=1}^{ns} Z_i^\gamma Y_i^{1-\gamma}} \quad (2.19)$$

avec $\gamma \approx 2/3$ (valeur conseillée dans [50] pour les écoulements de type couche limite) et

$$Z_i = \frac{Y_i/F_i}{\sum_{i=1}^{ns} Y_i/F_i} \quad (2.20)$$

Les coefficients F_i sont les facteurs de diffusion qui interviennent dans l'approximation de Bird pour les coefficients de diffusion binaire \mathcal{D}_{ij}^{bin} . Rappelons (*cf* sous-section 4.4.2 du chapitre 4 de la partie I) que l'approximation de Bird s'écrit

$$\mathcal{D}_{ij}^{bin} = \frac{\bar{D}}{F_i F_j} \quad (2.21)$$

et que les coefficients F_i sont calculés de manière empirique grâce à la formule

$$F_i = \left(\frac{W_i}{W_{ref}} \right)^\epsilon \quad (2.22)$$

avec $W_{ref} \approx 23.4$ et $\epsilon \approx 0.431$.

Les variables \tilde{Y}_k et \tilde{Y}_k^* ainsi définies vérifient

$$\sum_k \tilde{Y}_k = 1 \quad (2.23)$$

et

$$\sum_k \tilde{Y}_k^* = 1 \quad (2.24)$$

Les variables Y_i^* et \tilde{Y}_k^* permettent donc de prendre en compte les effets de coefficients de diffusion non égaux. On notera que si les espèces sont supposées diffuser de la même manière, alors les variables Y_i^* et Y_i sont égales.

Dans THERMO, le passage de C_H à C_M se fait par la corrélation [3], [50]

$$\frac{C_M}{C_H} = Le^{2/3} \quad (2.25)$$

où $Le = Sc/Pr$ désigne le nombre de Lewis.

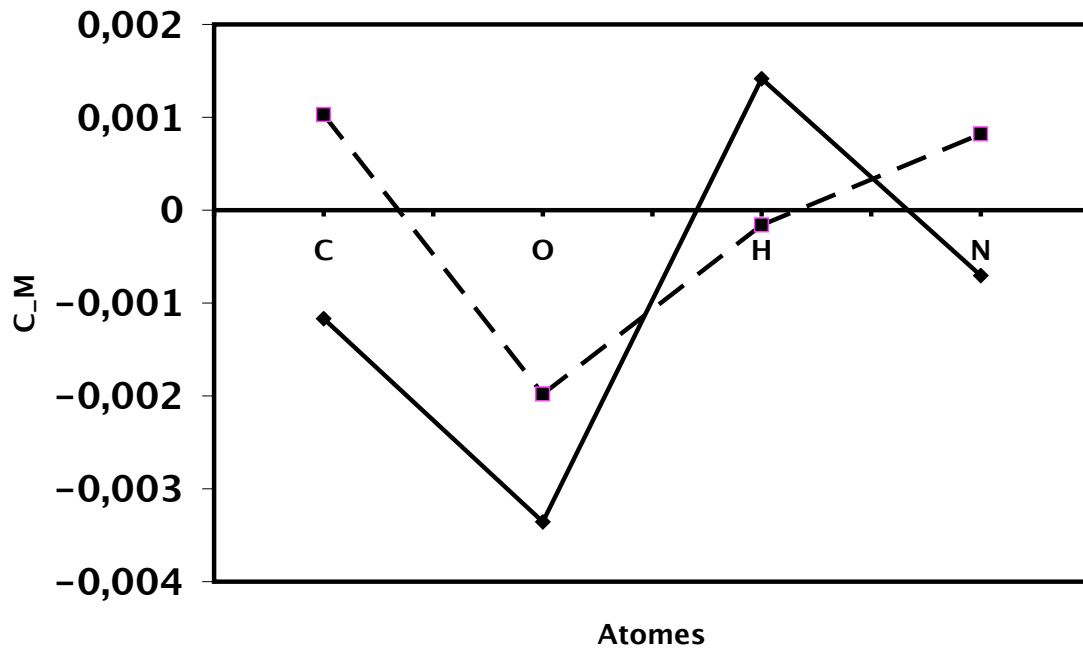


Fig. 2.14: Valeurs de C_M trouvées avec la DNS. — : Coefficients de diffusion égaux ; --- : Coefficients de diffusion non égaux

Pour chacun de ces deux cas, on cherche à savoir s'il existe une valeur de C_M qui vérifie la corrélation. Pour ce faire, on calcule, à l'aide des données fournies par la DNS, chacun des deux membres des corrélations (2.16) et (2.17) (au coefficient C_M près pour le membre de droite). Les valeurs alors obtenues pour C_M sont représentées sur le graphique 2.14.

Pour avoir une vision plus synthétique, on peut définir un C_M relatif en prenant pour référence le C_M de l'atome d'azote par exemple (noté $C_{M,N}$). Pour chaque atome k , le C_M relatif (noté $C_{M,k \text{ relatif}}$) s'écrit :

$$C_{M,k \text{ relatif}} = \frac{C_{M,k}}{C_{M,N}} \quad (2.26)$$

Les valeurs de $C_{M,k \text{ relatif}}$ sont regroupées dans les tableaux (2.1) et (2.2).

Dans chacun des deux cas, on observe de grandes disparités, tant sur le module de C_M que sur son signe. Cela montre qu'à une corrélation donnée, il n'existe pas un unique C_M validant cette corrélation. Par conséquent, une loi de paroi donnant le mélange à la paroi à partir du mélange loin de la paroi s'avère nécessaire afin d'être en mesure de prédire les flux d'espèce pariétaux. La dérivation d'une telle loi de paroi constitue une extension de l'actuelle thèse.

	$C_{M,k}$	$C_{M,k}$ relatif
N	- 0.0007	1
C	- 0.0012	1.7
O	- 0.0034	4.9
H	0.0014	- 2

Tab. 2.1: Valeurs relatives de C_M dans le cas où les coefficients de diffusion sont supposés être égaux

	$C_{M,k}$	$C_{M,k}$ relatif
N	0.0008	1
C	0.0010	1.3
O	- 0.0020	- 2.5
H	- 0.0002	- 0.3

Tab. 2.2: Valeurs relatives de C_M dans le cas où les coefficients de diffusion sont supposés être différents

2.4.5 Flux de chaleur

Lorsque les coefficients de diffusion ne sont pas supposés égaux, le module de thermo-chimie THERMO [3] calcule le flux de chaleur pariétal, en présence d'ablation, grâce à la formule [50] :

$$q_w = \rho_e U_e C_H (H_{s,r} - h_{s,w}) + \rho_e U_e C_M \sum_{i=1}^{ns} (Y_{i,e}^* - Y_{i,w}^*) \Delta h_i^{T_w} \quad (2.27)$$

les coefficients C_M et C_H étant corrélés par la formule (2.25). $H_{s,r}$ désigne l'enthalpie sensible de récupération, et $h_{s,w}$ l'enthalpie sensible au mur.

Grâce à la DNS, il est possible d'évaluer les deux membres de la formule (2.27), au coefficient C_M près pour le membre de droite.

Le mélange gazeux étant majoritairement composé de dihydrogène et d'azote, on effectue deux évaluations de q_w : l'une est basée sur le nombre de Lewis du dihydrogène ($Le_{H_2} = Sc_{H_2}/Pr \simeq 0.43$), l'autre sur le nombre de Lewis de l'azote ($Le_{N_2} = Sc_{N_2}/Pr \simeq 1.85$).

Pour une évaluation de q_w basée sur Le_{H_2} , on trouve qu'une valeur d'environ -2.96×10^{-2} doit être retenue pour le coefficient C_M , afin que la relation (2.27) soit valide. Pour une évaluation de q_w basée sur Le_{N_2} , cette valeur est alors d'environ -8.37×10^{-2} .

2.5 Loi de paroi

La loi de paroi couplée avec chimie (et parois inertes) est capable de reproduire les résultats de la DNS avec ablation, mais pas à tous les instants ; ceci est particulièrement

vrai pour le profil de température (figures 2.9 et 2.10). Il s'avère ainsi nécessaire de réfléchir à la dérivation d'une loi de paroi adaptée à l'ablation, tout en s'inspirant de la démarche adoptée pour obtenir la loi couplée vitesse-température avec chimie et parois inertes (où la pierre angulaire de la dérivation de cette loi de paroi fut la vérification de l'hypothèse d'équilibre chimique).

Le croquis de la figure 2.15 montre quelles pourraient être les entrées et sorties de la loi de paroi avec ablation.

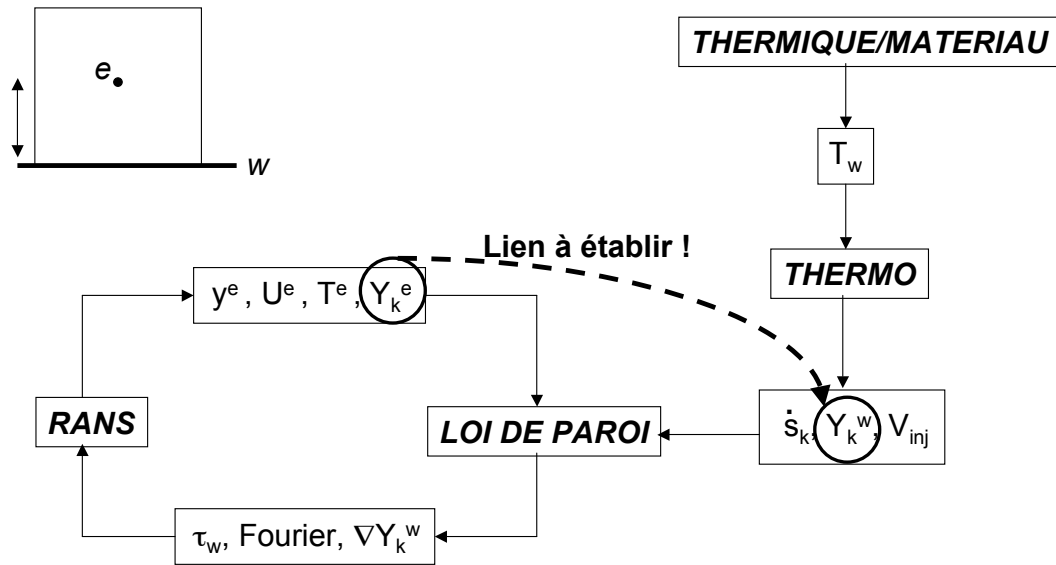


Fig. 2.15: Croquis de la future loi de paroi avec ablation

La vitesse d'injection V_{inj} est donnée par les taux de production surfacique \dot{s}_k grâce à la relation

$$\rho V_{inj} = \sum_k \dot{s}_k \quad (2.28)$$

Le taux de production surfacique \dot{s}_k de l'atome k est fourni par la loi d'Arrhénius.

La difficulté majeure réside dans la détermination du mélange à la paroi (*i.e.* les Y_k^w) connaissant le mélange loin de paroi (*i.e.* les Y_k^e). Actuellement, le module de thermochimie THERMO assure le passage des Y_k^e aux Y_k^w . Cependant, la DNS avec ablation a permis de montrer que les corrélations utilisées dans THERMO pour déterminer les flux d'espèce pariétaux ne sont pas satisfaisantes du fait de leur fort empirisme (*cf* sous-section 2.4.4). On ne peut donc pas les utiliser dans la future loi de paroi avec ablation.

D'autres pistes pour le passage des Y_k^e aux Y_k^w pourraient être explorées et testées grâce à la DNS :

- loi de type Kader qui tiendrait compte du nombre de Schmidt de chaque espèce ;
- hypothèse de type équilibre chimique avec composition atomique variable.

Conclusion de l'étude
et
perspectives

Ce travail de thèse a permis de progresser sur plusieurs fronts.

Tout d'abord, des données précises et représentatives d'un écoulement turbulent, chimiquement proche de celui rencontré dans les propulseurs à propergol solide, ont été générées par simulation numérique directe, dans des conditions thermodynamiques typiques du convergent des tuyères des gros propulseurs. Ces données, bien que spécifiquement développées pour les besoins de Snecma Propulsion Solide, offrent la possibilité d'identifier les effets prépondérants dans l'organisation de l'écoulement pariétal et dans la génération des flux pariétaux de chaleur et de masse. Deux types de paroi ont été successivement considérés dans ces simulations :

- parois inertes et isothermes : ces simulations permettent d'étudier spécifiquement les modifications à apporter aux modèles de paroi afin de prendre en compte les termes supplémentaires relatifs à la diffusion des différentes espèces dans le mélange, et de traiter la dépendance au nombre de Prandtl moléculaire ;
- parois ablatives et isothermes : ces simulations permettent de tester les hypothèses faites jusqu'à présent dans les modèles de paroi utilisés par Snecma Propulsion Solide.

D'autre part, une loi de paroi couplée dynamique-thermique a été développée et validée *a priori* à partir des données numériques fournies par les DNS avec parois inertes et isothermes. Cette loi de paroi étend largement les travaux réalisés pour Snecma-Moteurs Vernon ([24]) et permet de prendre en compte :

- les effets du nombre de Prandtl moléculaire de manière consistante avec la corrélation de Kader, qui est valable pour les scalaires passifs ;
- la diffusion des espèces dans le mélange ;
- le dégagement de chaleur lié aux réactions chimiques mises en jeu entre les espèces du mélange.

Il est important de noter que la loi de paroi obtenue, si elle a été développée pour le mélange retenu pour Snecma Propulsion Solide, possède une forme qui peut être étendue sans aucune difficulté à d'autres compositions chimiques. En effet, cette loi de paroi a été dérivée analytiquement à partir des équations de Navier-Stokes et constitue à ce titre une approximation en proche paroi de ces équations.

Par ailleurs, suivant le positionnement dans la tuyère (convergent, col ou divergent), le nombre de Mach varie de 0.2 à 2. Afin de disposer d'un outil permettant d'évaluer avec précision, et à moindre coût, les flux pariétaux dans toute la tuyère, il s'avère donc intéressant d'étendre aux régimes sonique et supersonique les lois de parois développées à Mach faible. Dans cette optique, la loi de paroi LMF-Pr-chimie a été étendue à des nombres de Mach élevés (loi LTM-Pr-chimie).

Enfin, les simulations avec parois ablatives et isothermes ont été réalisées en prenant en compte la réaction surfacique prépondérante de dégradation du carbone $C + H_2O \longrightarrow H_2 + CO$. L'analyse a montré que, combinée avec le modèle de Hirschfelder-Curtiss avec vitesse de correction pour la diffusion moléculaire des espèces dans le mélange, la cinétique chimique de surface peut être vue comme une condition limite faible pour les gradients pariétaux des fractions molaires des espèces. Les résultats de ces DNS ont permis d'évaluer la pertinence des hypothèses simplificatrices utilisées par Snecma Propulsion Solide et formulées aux Etats-Unis dans les années 1960. Ces DNS sont également utilisées pour

estimer les modifications introduites par l'effet ablatif de la surface carbonée sur le frottement pariétal et sur le flux de chaleur pariétal. Pour le régime ablatif étudié dans cette thèse, la loi de paroi LMF-Pr-chimie donne de bons résultats. Il faudra cependant continuer le travail entrepris, en simulant des taux d'injection pariétaux plus élevés.

Cette étude a donc permis d'initier le travail nécessaire de remise à plat des modèles existants pour la prévision des sollicitations pariétales thermiques dans les tuyères. Des données de référence inexistantes jusqu'alors ont été créées et utilisées pour proposer un modèle de paroi prenant en compte une partie des phénomènes mis en cause dans le problème industriel. Malgré la bonne performance des lois de paroi LMF-Pr et LMF-Pr-chimie développées dans cette thèse, nombre de questions demeurent sans réponse, ce qui ouvre un large champ à de futurs travaux de recherche. Parmi les phénomènes qu'il nous paraît intéressant d'étudier et de développer, on peut citer :

- **ablation et loi de paroi** : plusieurs phénomènes physiques viennent accroître la complexité de l'écoulement lorsque les parois sont ablatées. Tout d'abord, la couche limite subit un écoulement secondaire d'injection uniforme, qui pourra être pris en compte en intégrant le terme de convection normale dans les bilans de quantité de mouvement et d'énergie ([70]). Ensuite, la composition chimique du mélange change localement du fait de l'ablation, et les parois peuvent être vues comme une source de H_2 et de CO , et un puits de H_2O . Ceci provoque une augmentation des gradients des espèces, et peut éventuellement rompre localement l'équilibre chimique. Par conséquent, en s'appuyant sur les DNS en parois ablatives réalisées au cours de la présente étude et sur de nouvelles, il conviendrait de généraliser/adapter/remplacer l'hypothèse d'équilibre chimique formulée lors de l'écriture de la loi de paroi en parois inertes ;
- **effets des rugosités** : les imperfections géométriques peuvent devenir très importantes en cours de tir, et elles sont source de changements significatifs dans les transferts de chaleur et de quantité de mouvement entre la paroi et le fluide. Or, la plupart des travaux publiés semblent prendre en compte les rugosités de façon très globale, en proposant une modification de la constante additive de la loi logarithmique pour la vitesse. Il serait donc judicieux de déterminer si une prise en compte plus fine des rugosités est nécessaire ;
- **modélisation de la diffusion multi-espèce** : les travaux réalisés jusqu'à présent utilisent une modélisation de Hirschfelder-Curtiss avec vitesse de correction pour la diffusion moléculaire des espèces dans le mélange, et supposent que les effets Soret et Dufour sont négligeables. Il serait intéressant de savoir si ces hypothèses sont bien vérifiées dans le cas d'un mélange typique de propulseur à propergol solide (mélange dans lequel la fraction molaire d'hydrogène est significative).

Annexe A

Le code utilisé : AVBP

AVBP [91] est un code de mécanique des fluides massivement parallèle, développé au CERFACS¹ principalement, ainsi qu'à l'IFP². Il est à ce jour l'un des outils de mécanique des fluides numérique les plus avancés pour la simulation numérique des écoulements turbulents réactifs non stationnaires, et il a été largement validé [1]. Il est utilisé tant pour la recherche académique, que pour la recherche appliquée à des configurations industrielles.

AVBP résout les équations de Navier-Stokes bidimensionnelles ou tridimensionnelles, pour des écoulements compressibles, réactifs, en régime laminaire ou turbulent, sur des maillages structurés, non structurés ou hybrides. Initialement conçu pour simuler des écoulements stationnaires externes pour des applications en aérodynamique, AVBP est aujourd'hui quasi-exclusivement³ consacré à la simulation des écoulements réactifs non stationnaires dans les chambres de combustion. Ces activités sont motivées par l'intérêt grandissant porté à la compréhension de la structure des écoulements turbulents non stationnaires, ainsi qu'aux mécanismes conduisant à la turbulence. La prédiction de ces écoulements turbulents non stationnaires repose sur l'approche LES ("Large Eddy Simulation"), qui est apparue comme une technique prospective pour de tels écoulements. Mais AVBP offre aussi la possibilité d'effectuer des DNS ("Direct Numerical Simulation").

Le code AVBP utilise une formulation mixte volumes finis/éléments finis, basée sur une approche "cell-vertex" d'ordre 2 ou 3 en espace et en temps. Le schéma de discrétisation utilisé est très peu dissipatif : il est donc bien adapté aux simulations numériques directes d'écoulements turbulents [19]. Une description complète se trouve à la page internet http://www.cerfacs.fr/cfd/avbp_code.php.

¹Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique

²Institut Français du Pétrole

³Il est aussi utilisé dans des applications biomédicales pour simuler les écoulements sanguins dans les artères.

Annexe B

Thermochimie

Le mélange gazeux qui est éjecté par la tuyère est composé d'une centaine d'espèces. De plus, il réagit chimiquement avec la paroi carbone/carbone de la tuyère, ce qui modifie sa composition et change les réactions chimiques qui ont lieu.

La méthodologie adoptée pour la dérivation du modèle de paroi est totalement indépendante des espèces qui composent le mélange gazeux. En effet, la structure du modèle de paroi vient de l'analyse des équations, tandis que les constantes du modèle sont fixées grâce à des données numériques ou expérimentales. Les DNS pourront donc être réalisées avec un mélange gazeux constitué d'un nombre restreint d'espèces, et ceci sans entâcher la validité, ni réduire la généralité, du modèle de paroi qui sera développé. Par ailleurs, le code de calcul ne suppose pas l'équilibre chimique : il est donc indispensable de concevoir un schéma cinétique pour le mélange, afin de reproduire les changements de concentration des espèces gardées.

B.1 Choix d'un mélange équivalent

Snecma Propulsion Solide nous a fourni les concentrations d'équilibre pour toutes les espèces présentes dans le mélange gazeux éjecté par la tuyère, par tranches de 500 K entre 1500 K et 3500 K, et pour des pressions de 1 MPa, 6 MPa et 10 MPa. Pour chaque niveau de pression, le traitement suivant est appliqué au "vrai" mélange afin de définir un mélange équivalent :

- on ne considère que les espèces gazeuses ;
- seules les espèces dont les fractions molaires sont supérieures à 0.001 sont retenues ;
- les composés chlorés (il s'agit de HCl essentiellement) sont remplacés par de l'azote. Les masses molaires du chlore et de l'azote, respectivement égales à 0.035 kg/mol et 0.028 kg/mol, sont suffisamment proches l'une de l'autre pour justifier ce type d'approximation d'un point de vue dynamique (pas chimique) ;
- l'azote sert de diluant : on en rajoute de manière à satisfaire la relation $\sum_{i=1}^{ns} X_i = 1$, où ns désigne le nombre d'espèces contenues dans le mélange gazeux et X_i la fraction molaire de l'espèce i .

Au final, seulement sept espèces subsistent : H_2 , N_2 , CO , H_2O , CO_2 , H et OH .

Au col de la tuyère la pression statique est de l'ordre de 6 MPa, alors qu'elle vaut 10 MPa dans le convergent et 1 MPa dans le divergent. La température des parois et celle des gaz éjectés varient entre 2500 K et 3500 K selon l'endroit (convergent, col, divergent) où l'on se place.

On donne ci-après la composition d'équilibre du mélange équivalent pour ces différentes conditions thermodynamiques.

B.1.1 $P = 1$ MPa

Le tableau B.1 recense pour différentes températures les fractions molaires des espèces retenues.

T (K)	H_2	N_2 effectif	CO	H_2O	CO_2	H	OH
3500	0.27968	0.25637	0.21949	0.11656	0.01129	0.09784	0.01877
3000	0.33227	0.26532	0.23614	0.12234	0.01191	0.02855	0.00347
2500	0.3498	0.271	0.23948	0.12151	0.01354	0.00467	0
2000	0.35632	0.27191	0.23664	0.11789	0.01724	0	0
1500	0.36567	0.27174	0.22738	0.10865	0.02656	0	0

Tab. B.1: Composition du mélange équivalent en fractions molaires pour $P = 1$ MPa

La colonne nommée " N_2 effectif" donne la fraction molaire de N_2 après remplacement des composés chlorés par N_2 et dilution complémentaire par N_2 .

On remarque qu'entre 1500 K et 3500 K, les fractions molaires de H et OH augmentent, tandis que celles de CO_2 et H_2 diminuent.

Avec le mélange équivalent qui vient d'être défini, il faut vérifier que les fractions atomiques de C , O , H et N sont raisonnablement constantes sur la gamme de températures allant de 1500 K à 3500 K. Le tableau B.2 montre que cette condition est vérifiée ; il sera donc possible de trouver un schéma cinétique pour le mélange équivalent. Par ailleurs, la conservation de la masse globale est vérifiée.

T (K)	3500	3000	2500	2000	1500
C	0.11368417	0.11779931	0.11876754	0.11890611	0.11892975
O	0.18591041	0.18320274	0.18215999	0.182195	0.18225374
H	0.44782538	0.44699625	0.44465776	0.44419778	0.44428417
N	0.25258004	0.25200171	0.25441471	0.25470112	0.25453234
Somme	1	1	1	1	1

Tab. B.2: Composition du mélange équivalent en fractions atomiques pour $P = 1$ MPa

B.1.2 $P = 6$ MPa

Le tableau B.3 recense pour différentes températures les fractions molaires des espèces retenues.

T (K)	H ₂	N ₂ effectif	CO	H ₂ O	CO ₂	H	OH
3500	0.31792	0.26124	0.23267	0.12637	0.01142	0.04259	0.00779
3000	0.34284	0.26813	0.23958	0.12429	0.0119	0.01184	0.00142
2500	0.35137	0.27114	0.23998	0.12203	0.01375	0.00191	0
2000	0.35632	0.27178	0.23666	0.11798	0.01726	0	0
1500	0.38949	0.18677	0.22965	0.15757	0.03652	0	0

Tab. B.3: Composition du mélange équivalent en fractions molaires pour $P = 6$ MPa

Le tableau B.4 donne les fractions atomiques de C , O , H et N en fonction de la température du mélange et montre qu'il y a conservation de la masse globale.

T (K)	3500	3000	2500	2000	1500
C	0.11649962	0.11837974	0.1188317	0.11891872	0.12131225
O	0.18598225	0.1831572	0.18238357	0.18225586	0.20977262
H	0.44814815	0.4460282	0.44463348	0.44425919	0.49866687
N	0.24936999	0.25243486	0.25415126	0.25456623	0.17024826
Somme	1	1	1	1	1

Tab. B.4: Composition du mélange équivalent en fractions atomiques pour $P = 6$ MPa

Le mélange est à composition atomique constante entre 2000 K et 3500 K. Par contre, à 1500 K, il y a beaucoup plus d'atomes d'oxygène et d'hydrogène, et beaucoup moins d'atomes d'azote. Il n'est donc pas possible d'écrire un schéma cinétique capable de reproduire les changements de composition du mélange pour des températures d'équilibre inférieures à 2000 K. Cela ne gêne en rien notre étude car les données fournies par Snecma Propulsion Solide indiquent que seule la gamme $2500 \text{ K} \leq T \leq 3500 \text{ K}$ est intéressante.

B.1.3 $P = 10$ MPa

Le tableau B.5 recense pour différentes températures les fractions molaires des espèces retenues.

Le tableau B.6 donne les fractions atomiques de C , O , H et N en fonction de la température du mélange et montre qu'il y a conservation de la masse globale.

T (K)	H ₂	N ₂ effectif	CO	H ₂ O	CO ₂	H	OH
3500	0.32446	0.26246	0.23484	0.12750	0.01139	0.03332	0.00603
3000	0.34453	0.2685	0.24013	0.12465	0.01190	0.00919	0.00110
2500	0.35168	0.27108	0.24008	0.12211	0.01357	0.00148	0
2000	0.35622	0.27182	0.23665	0.11804	0.01727	0	0
1500	0.39027	0.17274	0.22874	0.16926	0.03899	0	0

Tab. B.5: Composition du mélange équivalent en fractions molaires pour $P = 10$ MPa

T (K)	3500	3000	2500	2000	1500
C	0.11694221	0.11847078	0.11885015	0.11891482	0.1212408
O	0.18576917	0.18317539	0.18242433	0.18228267	0.21554625
H	0.44798796	0.44592829	0.44469122	0.44420716	0.50676327
N	0.24930066	0.25242554	0.2540343	0.25459535	0.15644968
Somme	1	1	1	1	1

Tab. B.6: Composition du mélange équivalent en fractions atomiques pour $P = 10$ MPa

Le mélange est à composition atomique constante entre 2000 K et 3500 K. Par contre, à 1500 K, il y a beaucoup plus d'atomes d'oxygène et d'hydrogène, et beaucoup moins d'atomes d'azote. Par conséquent, le schéma cinétique ne pourra mimer les changements de composition du mélange que pour des températures d'équilibre comprises entre 2000 K et 3500 K.

B.2 Schéma cinétique

Le schéma cinétique pour le mélange équivalent est mis au point à partir des équations élémentaires de GRI-Mech ([2]) qui ne font intervenir que les sept espèces retenues. Pour une réaction chimique donnée, GRI-Mech fournit les coefficients de la loi d'Arrhénius que sont la constante pré-exponentielle (en mol.cm.s.K), l'exposant de la température et l'énergie d'activation (en cal/mol) (respectivement première, deuxième et troisième colonne de nombres de la figure B.1). Les réactions chimiques qui ont lieu dans le mélange équivalent sont recensées dans la figure B.1 et sont écrites au format de la librairie CHEMKIN¹. Il s'agit de réactions chimiques avec troisième corps (celui-ci étant noté avec la lettre M dans la figure B.1). Pour une réaction chimique donnée, le troisième corps est une ou plusieurs espèces du mélange, et il joue le rôle de catalyseur, ou au contraire, d'inhibiteur. Son

¹CHEMKIN [87] est un ensemble de programmes et de librairies pour l'étude de cinétiques chimiques en phase gazeuse. Il permet d'incorporer la cinétique chimique complexe en dynamique des fluides, fournit les réactions chimiques et les taux de réaction associés. Plus d'une centaine de routines forment une librairie permettant d'obtenir des informations sur les équations d'état, les propriétés thermodynamiques et les taux de production chimique.

activité est prise en compte grâce à une fonction d'efficacité ([87]), qui apparaît dans l'expression du taux de progression de la réaction chimique dans laquelle intervient le troisième corps.

En conséquence, en présence de troisième corps, le taux de progression \mathcal{Q}_j de la réaction j énoncé au chapitre 4 de la partie I (formule (4.34)) se trouve modifié, et s'écrit :

$$\mathcal{Q}_j = \left(\sum_{k=1}^N \alpha_{k,j} \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right) \right) \left(K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \right) \quad (\text{B.1})$$

où $\alpha_{k,j}$ dénote la fonction d'efficacité de l'espèce k dans la réaction j .

Le premier facteur de la formule (B.1) est spécifique à la prise en compte du troisième corps. Si, pour une réaction j , toutes les espèces k du mélange contribuent de la même manière en tant que troisième corps, alors tous les $\alpha_{k,j}$ sont égaux à un, et le premier facteur de l'équation (B.1) n'est autre que la concentration molaire totale du mélange. Cependant, en général, certaines espèces sont plus actives que d'autres dans leur rôle de troisième corps. Les valeurs à donner aux $\alpha_{k,j}$ sont disponibles sur le site internet de GRI-Mech ([2]) pour toute une collection de réactions chimiques.

```

ELEMENTS
H O C N
END
SPECIES
H2 N2 CO H2O H CO2 OH
END
REACTIONS
2H+M<=>H2+M          1.000E+18  -1.000  .00
H2/ .00/ H2O/ .00/
2H+H2<=>2H2          9.000E+16  -.600  .00
2H+H2O<=>H2+H2O      6.000E+19 -1.250  .00
2H+CO2<=>H2+CO2      5.500E+20 -2.000  .00
H+OH+M<=>H2O+M       2.200E+22 -2.000  .00
H2/ .73/ H2O/3.65/
OH+H2<=>H+H2O         2.160E+08  1.510  3430.00
OH+CO<=>H+CO2         4.760E+07  1.228  70.00
END

```

Fig. B.1: Réactions chimiques élémentaires issues de GRI-Mech et écrites au format CHEMKIN

Il est nécessaire de vérifier que l'équilibre chimique atteint par le mélange équivalent est identique à celui atteint par le mélange éjecté par les tuyères de propulsion de Snecma Propulsion Solide. Afin de déterminer les compositions à l'équilibre du mélange équivalent,

le logiciel AURORA PSR² (PSR pour “Perfectly Stirred Reactor”) est utilisé en mode stationnaire et volume constant :

- on lui donne la composition d’équilibre du mélange équivalent à 3000 K, par exemple, et à la pression désirée P_0 ($P_0 = 1$ MPa, 6 MPa, ou 10 MPa) ;
- on impose une température T_0 au réacteur, ainsi qu’un grand temps de séjour (on prendra successivement T_0 égal à 1500 K, 2000 K, 2500 K et 3500 K) ;
- on obtient alors la composition d’équilibre du mélange équivalent pour T_0 et P_0 .

Remarque :

C’est à partir du fichier montré à la figure B.1 qu’AURORA PSR génère un fichier contenant toutes les informations sur la chimie de la phase gazeuse.

Comparons à présent les résultats obtenus grâce à AURORA PSR aux données fournies par Snecma Propulsion Solide, pour chacune des trois pressions.

B.2.1 P = 1 MPa

Le graphique de la figure B.2 montre l’évolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur, lorsque la température du réacteur est égale à 1500 K et que la composition initiale du mélange est celle fournie par Snecma Propulsion Solide à 3000 K.

L’expression “schéma GRI-Mech complet” désigne le schéma cinétique GRI-Mech (composé de nombreuses réactions chimiques, dont les sept indiquées à la figure B.1) appliqué au mélange équivalent.

Par “schéma réduit” (“réduit” par opposition à “complet”), on entend le schéma cinétique décrit à la figure B.1, et qui ne fait intervenir que les sept espèces gazeuses retenues pour former le mélange équivalent.

Pour de grands temps de séjour (de l’ordre de 10^4 s), on constate que les résultats obtenus avec le schéma GRI-Mech complet, le schéma réduit et le schéma réduit sans troisième corps sont identiques. Cela indique que le mélange équivalent est stable, dans le sens où le schéma GRI-Mech complet ne génère pas d’autres espèces gazeuses de manière significative lorsqu’il est appliqué initialement aux sept espèces H_2 , N_2 , CO , H_2O , CO_2 , H et OH . Ce résultat est en accord avec la figure B.3 qui confronte aux données fournies par Snecma Propulsion Solide les résultats issus de calculs réalisés avec AURORA PSR et le schéma cinétique réduit.

²Le logiciel AURORA prédit le comportement d’un réacteur bien mélangé ou parfaitement agité, stationnaire ou non. Il résout un système d’équations algébriques non linéaires qui équilibrent la masse et l’énergie dans le domaine. Il fonctionne avec la librairie CHEMKIN pour les mécanismes de réactions et les propriétés thermodynamiques des espèces.

Le logiciel PSR permet de tester et de développer les mécanismes de réactions chimiques. Il prédit la température et la composition de l’état stationnaire dans un réacteur parfaitement prémélangé à pression constante.

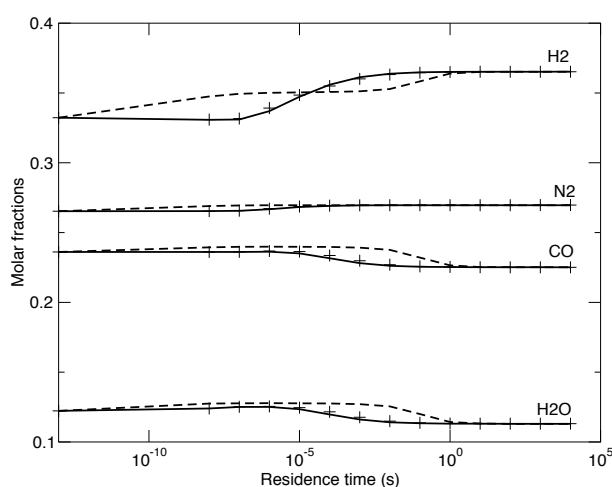


Fig. B.2: Evolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur pour $P = 1$ MPa. +++ : Schéma GRI-Mech complet ; — : Schéma réduit ; --- : Schéma réduit sans troisième corps

Cependant, seule la prise en compte du troisième corps dans le schéma réduit permet de reproduire les résultats de GRI-Mech pour des temps de séjour intermédiaires. La figure B.2 montre que le schéma réduit avec troisième corps qui a été conçu est tout à fait raisonnable.

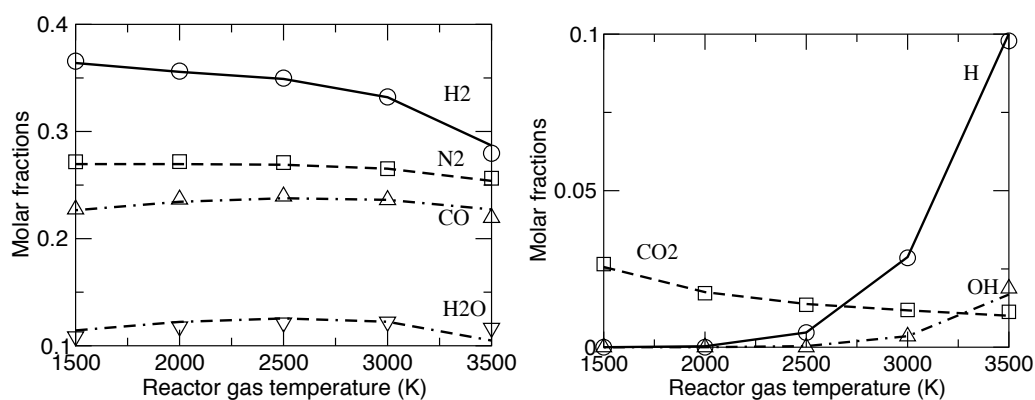


Fig. B.3: Comparaison entre AURORA PSR avec schéma cinétique réduit et les données de Snecma Propulsion Solide pour $P = 1$ MPa. Symboles : Snecma Propulsion Solide ; Lignes en trait plein, pointillés et tirets : Calculs AURORA PSR avec le schéma cinétique réduit

L'accord général est très bon même si de légers écarts sont visibles à 3500 K (*cf* figure B.3) : ils sont dus à la diminution de la fraction atomique de carbone et à l'augmentation de celle d'oxygène entre 3000 K et 3500 K constatées dans le tableau B.2.

B.2.2 P = 6 MPa

Le graphique de la figure B.4 montre l'évolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur, lorsque la température du réacteur est égale à 2000 K et que la composition initiale du mélange est celle fournie par Snecma Propulsion Solide à 3000 K. Contrairement au cas $P = 1$ MPa, on choisit une température de réacteur de 2000 K, car dans la sous-section B.1.2 on a montré qu'il était impossible de concevoir un schéma cinétique capable de reproduire les changements de composition du mélange pour des températures d'équilibre inférieures à 2000 K.

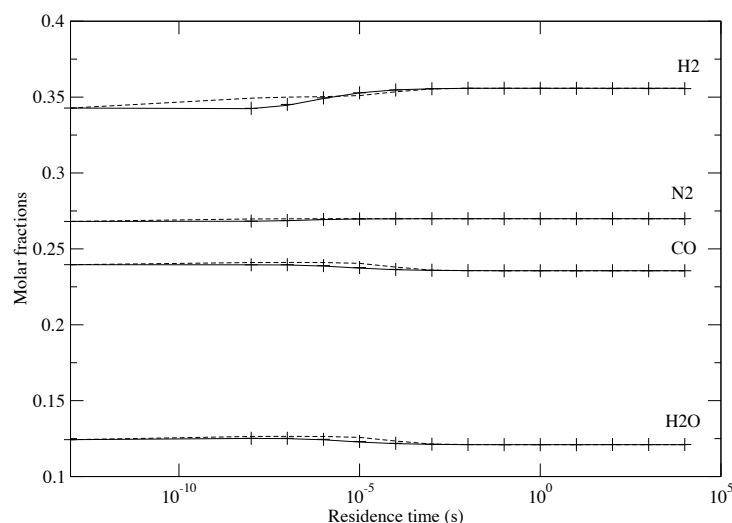


Fig. B.4: Evolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur pour $P = 6$ MPa. +++ : Schéma GRI-Mech complet ; — : Schéma réduit ; - - - : Schéma réduit sans troisième corps

A nouveau, on constate que :

- pour un temps de séjour suffisamment grand (de l'ordre de 10^4 s), les trois schémas cinétiques donnent les mêmes résultats ;
- pour des temps de séjour intermédiaires, la présence du troisième corps dans le schéma réduit est nécessaire pour retrouver les résultats du schéma GRI-Mech ; on note néanmoins que l'écart entre GRI-Mech et le schéma réduit sans troisième corps est, d'une manière générale, plus faible qu'à $P = 1$ MPa.

La figure B.5 compare les résultats des calculs menés avec AURORA PSR sur le schéma cinétique réduit aux données fournies par Snecma Propulsion Solide. Cette figure corrobore le fait que le schéma cinétique n'est pas capable de reproduire les changements de composition du mélange pour des températures d'équilibre inférieures à 2000 K (*cf* sous-section B.1.2). En dessous de 2000 K, on retrouve sur les graphiques de la figure B.5 le

défaut d'atomes d'azote et l'excès d'atomes d'hydrogène et d'oxygène constatés dans le tableau B.4. Par contre, pour des températures d'équilibre comprises entre 2000 K et 3500 K, nos résultats concordent avec les données de Snecma Propulsion Solide.

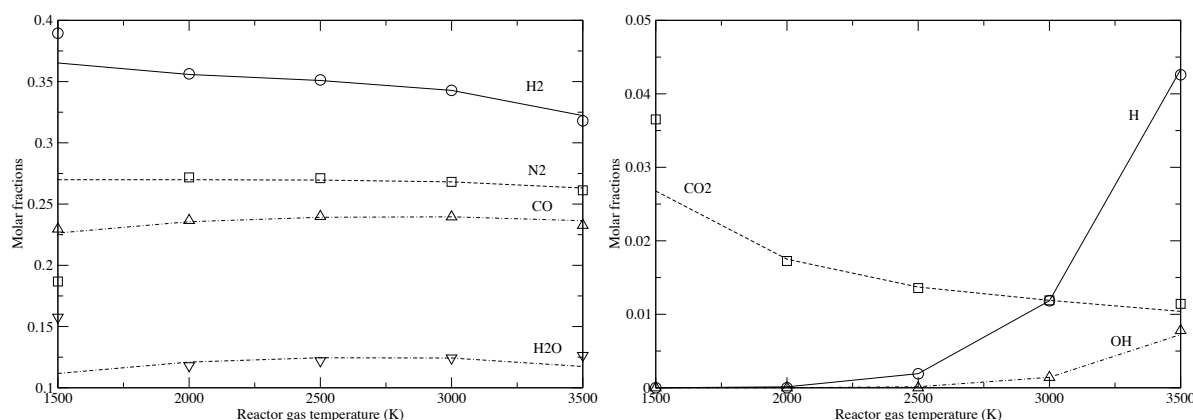


Fig. B.5: Comparaison entre AURORA PSR avec schéma cinétique réduit et les données de Snecma Propulsion Solide pour $P = 6$ MPa. Symboles : Snecma Propulsion Solide; Lignes en trait plein, pointillés et tirets : Calculs AURORA PSR avec le schéma cinétique réduit

B.2.3 $P = 10$ MPa

Le graphique de la figure B.6 montre l'évolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur, lorsque la température du réacteur est égale à 2000 K et que la composition initiale du mélange est celle fournie par Snecma Propulsion Solide à 3000 K. La température du réacteur n'est pas prise égale à 1500 K car pour des températures d'équilibre inférieures à 2000 K, le schéma cinétique ne peut pas restituer les changements de composition du mélange (*cf* sous-section B.1.3).

Au bout d'un temps de séjour de 10^4 s dans le réacteur, les courbes obtenues avec chacun des trois schémas cinétiques se superposent, et pour des temps de séjour intermédiaires, elles sont très proches les unes des autres. Le schéma réduit avec troisième corps permet cependant un parfait accord avec les données GRI-Mech pour des temps de séjour intermédiaires.

Là encore, les graphiques de la figure B.7 confirment le fait qu'à 10 MPa, le schéma cinétique ne soit pas capable de reproduire les changements de composition du mélange pour des températures d'équilibre inférieures à 2000 K (*cf* sous-section B.1.3). L'excès d'atomes d'hydrogène et d'oxygène ainsi que le défaut d'atomes d'azote (*cf* tableau B.6) y apparaissent clairement. Pour des températures d'équilibre variant entre 2000 K et 3500 K, nos résultats s'accordent avec les données de Snecma Propulsion Solide bien qu'à 3500 K

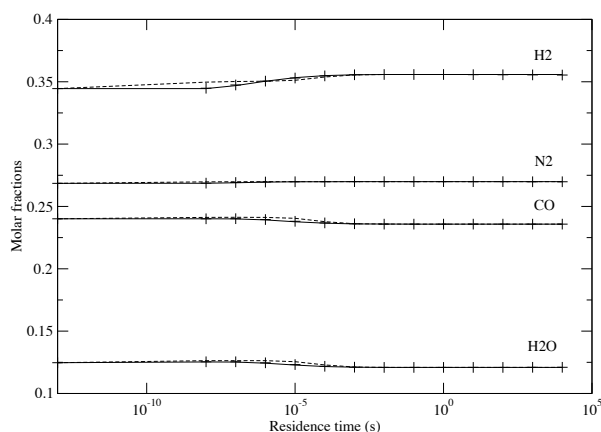


Fig. B.6: Evolution des fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O en fonction du temps de séjour dans le réacteur pour $P = 10$ MPa. +++ : Schéma GRI-Mech complet ; — : Schéma réduit ; - - - : Schéma réduit sans troisième corps

de petits écarts soient observés pour H_2O , CO_2 , OH , H_2 et CO ; ils sont liés aux faibles variations des fractions atomiques entre 3000 K et 3500 K apparaissant dans le tableau B.6.

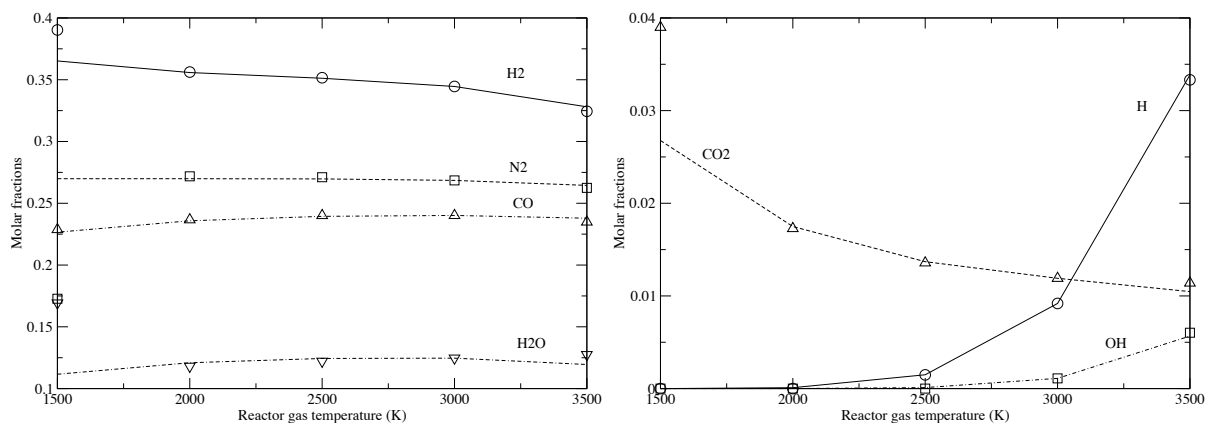


Fig. B.7: Comparaison entre AURORA PSR avec schéma cinétique réduit et les données de Snecma Propulsion Solide pour $P = 10$ MPa. Symboles : Snecma Propulsion Solide ; Lignes en trait plein, pointillés et tirets : Calculs AURORA PSR avec le schéma cinétique réduit

B.3 AVBP et le schéma cinétique réduit avec troisième corps

Le schéma cinétique réduit avec troisième corps a été implémenté dans le code AVBP.

On part de la composition du mélange équivalent à 3000 K et 1 MPa, et on choisit une température initiale égale à 1500 K. Les fractions molaires des différentes espèces (H_2 , N_2 , CO , H_2O , H , CO_2 et OH) changent pour atteindre un autre point d'équilibre : c'est ce que montrent les figures B.8 et B.9. Ces figures comparent les valeurs obtenues avec AURORA PSR (+ + +) en mode instationnaire et volume fixe et AVBP (—).

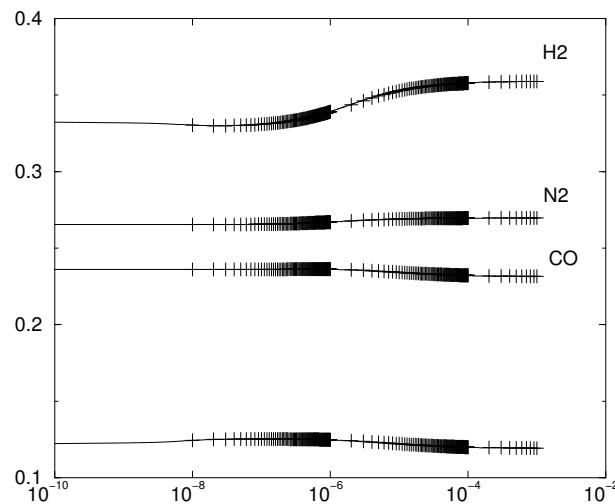


Fig. B.8: Comparaison entre AVBP avec schéma cinétique réduit et AURORA PSR pour les fractions molaires de H_2 , N_2 , CO et H_2O à 1 MPa initialement. + + + : AURORA PSR ; — : AVBP

Les réactions chimiques ne sont pas toutes à dégagement de chaleur nul. La température augmente donc un peu, comme le montre la figure B.10.

Remarque : La pression augmente aussi un peu pour atteindre 1.15 MPa.

Dans les trois figures, les résultats issus des deux calculs se superposent parfaitement, ce qui valide l'implémentation dans AVBP du schéma cinétique réduit avec troisième corps.

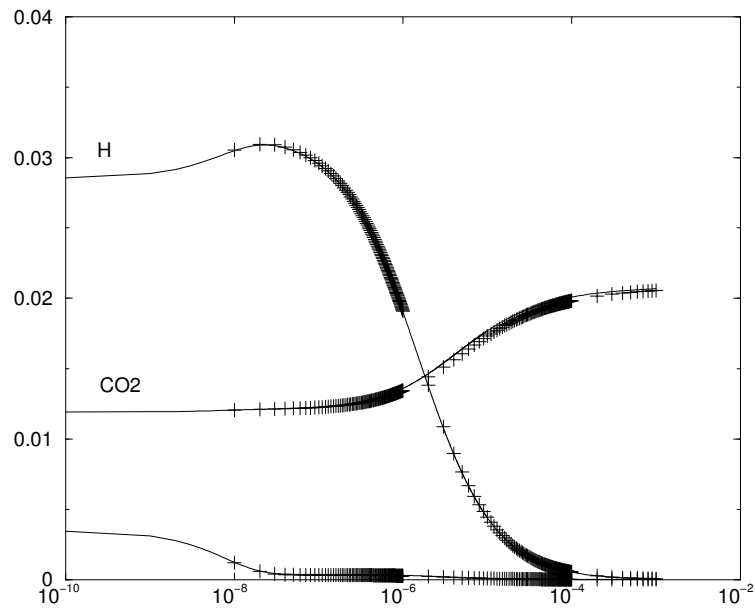


Fig. B.9: Comparaison entre AVBP avec schéma cinétique réduit et AURORA PSR pour les fractions molaires de H , CO_2 et OH à 1 MPa initialement. + + + : AURORA PSR ; — : AVBP

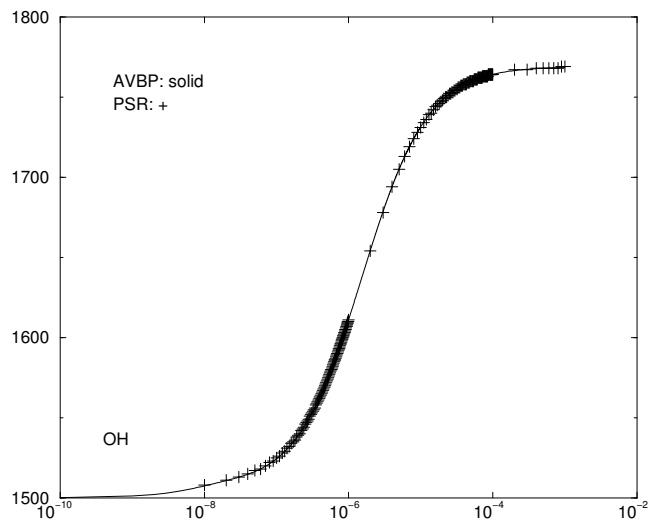


Fig. B.10: Comparaison entre AVBP avec schéma cinétique réduit et AURORA PSR pour la température du mélange à 1 MPa initialement. + + + : AURORA PSR ; — : AVBP

Annexe C

Communications

Une partie des travaux de cette thèse a été présentée au cours d'un mini-symposium intitulé "Méthodes multi-échelles en mécanique des fluides numérique", lors de la conférence ENUMATH 2005 (6^{ième} conférence européenne sur les mathématiques numériques et les applications avancées), qui a eu lieu à Saint Jacques de Compostelle (Espagne) du 18 au 22 juillet 2005.

Une autre partie des travaux de cette thèse a été présentée lors de la conférence "Direct and Large-Eddy simulation" (6^{ième} conférence ERCOFTAC), qui s'est tenue à Poitiers (France) du 12 au 14 septembre 2005. Ces travaux ont fait l'objet d'un article envoyé à cette conférence et retenu pour publication.

Direct Numerical Simulation of Reacting Turbulent Multi-Species Channel Flow

L. Artal^{1,2} and F. Nicoud²

¹ CERFACS, CFD Team, 42 avenue Gaspard Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 1, France

Lea.Artal@cerfacs.fr

² University Montpellier II - CNRS UMR 5149, I3M - CC 51, Place Eugène Bataillon, 34095 Montpellier Cedex 5, France

nicoud@math.univ-montp2.fr

1 Introduction

Rocket engines eject their gases through propulsion nozzles which are subjected to considerable thermal fluxes. However they must stay as light as possible. This requires precise calculations of wall heat flux in order to optimize the design of insulating material. Industrial design codes use Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) methods. High-Reynolds number approaches are often preferred for wall-bounded flows because they require less mesh refinement than their low-Reynolds number counterpart and they are usually more stable. This means using wall functions to assess the momentum/energy fluxes at the solid boundaries knowing the outer flow condition at the first off-wall grid points. The classic logarithmic law is implemented in most of the RANS codes and provides reasonably good results for simple incompressible flows. The trend today is to generalize this wall function approach to account for more physics [1], [2]. Development of wall functions that take into account strong changes in the density due to strong temperature gradient and fluid non-homogeneity is necessary to simulate parietal heat transfers with good accuracy and at moderate cost by using RANS-based design codes. Because the wall heat flux depends on the details of the turbulent flow in the near-wall region, it is essential to analyze detailed relevant data to support the development of such wall models. Classic experimental techniques cannot provide the required space resolution and improved wall functions can hardly be designed or validated due to the lack of relevant data. Direct Numerical Simulations (DNS) can then be used to generate precise and detailed data sets of generic turbulent flows [3], [4] under realistic operating conditions. The first objective of this paper is to describe a DNS of anisothermal multi-species channel flow. The second objective is to illustrate how it can be used to improve the existing wall functions and account for more physics in the heat flux assessment.

2 L. Artal and F. Nicoud

2 Configuration of the DNS: fluid flow, thermochemistry and solved equations

A sketch of the computational domain and the coordinate system is shown in figure 1.

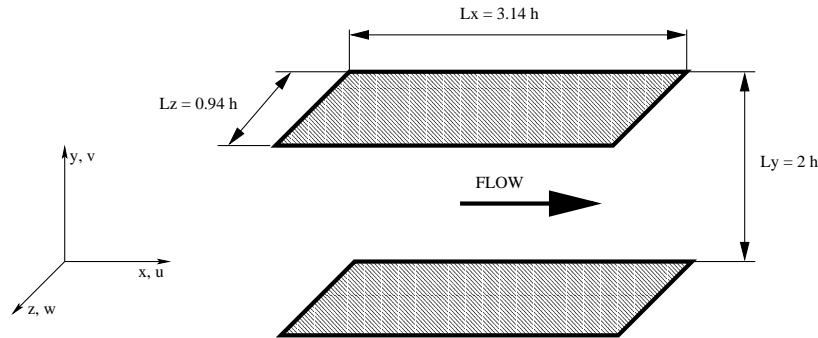


Fig. 1. Geometry of computational domain and coordinate system

A periodic boundary condition is used in the streamwise and spanwise directions, while a no-slip isothermal condition is applied to both walls. In order to save CPU time, the DNS configuration is inspired by the minimal channel flow configuration presented in [5] for instance. The domain dimensions in terms of wall units are $L_x^+ \simeq 560$, $L_y^+ \simeq 360$ and $L_z^+ \simeq 160$ in the streamwise, normal and spanwise directions respectively ($L_i^+ = L_i u_\tau / \nu_w$ where u_τ denotes the friction velocity and ν_w the kinematic viscosity at the wall). The mesh contains $17 \times 130 \times 33$ nodes. The associated resolution in x and z which is $\Delta x^+ \simeq 35$ and $\Delta z^+ \simeq 5$, allows to capture the elongated turbulence structure. Uniform in the streamwise and spanwise directions, the grid spacing of the parallelepipedic mesh is refined with a hyperbolic tangent law in the direction normal to the flow, in order to be able to solve the viscous sublayer. This results in $\Delta y^+ \simeq 0.9$ at the wall and $\Delta y^+ \simeq 5$ near the centerline.

The Mach number Ma is about 0.2 so that the effects of compressibility can be neglected and the CFL condition is not too restrictive. For the friction Reynolds number Re_τ , the classic value 180 encountered in the literature of turbulent channels with inert walls ([6] for instance) is chosen. Table 1 gathers a few data representative of the flow configuration.

\mathbf{P} (MPa)	\mathbf{T}_{wall} (K)	\mathbf{T}_{mean} (K)	\mathbf{h} (mm)	\mathbf{Ma}_{max}	$\mathbf{Re}_\tau = \mathbf{u}_\tau \mathbf{h} / \nu_w$	$\mathbf{Re} = \mathbf{U}_{\text{max}} \mathbf{h} \bar{\rho} / \bar{\mu}$
10	2700	3000	0.115	0.2	180	3400

Table 1. Data related to the DNS configuration

This computation is initialized thanks to an already turbulent solution coming from a DNS performed on the same configuration but without chemistry, and

having reached a converged state.

The ejected gases from propulsion nozzles form a reactive³ mixture made up with about a hundred gaseous species. The DNS is performed with a gaseous mixture representative of these gases. The transport properties of this equivalent mixture are obtained thanks to the EGLIB library [7]. The DNS is realized with a Schmidt number per species indicated in table 2, and a Prandtl number for the mixture equal to 0.47. Because the numerical code used does not assume chemical equilibrium, a kinetic scheme which reproduces concentration changes in the equivalent mixture through seven chemical reactions has been tuned, thanks to the GRI-Mech data [8]. In report [9], it has been verified that this kinetic scheme gives the right compositions at equilibrium.

Species	H ₂	N ₂	CO	H ₂ O	H	CO ₂	OH
Sc	0.20	0.87	0.86	0.65	0.15	0.98	0.53

Table 2. Schmidt number Sc of each gaseous species at $P = 10$ MPa

We consider the three-dimensional compressible unsteady Navier-Stokes equations with chemistry and spatially constant source terms. Because of periodicity in the streamwise direction, a source term S_{qdm} that acts like a pressure gradient must be added to the streamwise component of the momentum conservation equation. Moreover, it is necessary to add a source term S_e to the total energy conservation equation in order to compensate for the thermal losses occurring at the isothermal wall. This source term is constant in space so that it does not modify the temperature profile and drives the averaged temperature in the channel towards the target value T_{mean} . T_{mean} is fixed so that the temperature gradient in the boundary layer of a propulsion nozzle is reproduced. The computation is performed with the AVBP parallel code developed at CERFACS and dedicated to DNS/LES of reacting flows on unstructured and hybrid meshes. This code has been thoroughly validated [10].

3 Results of the DNS: chemical equilibrium, shear stress and heat flux

Because of very high pressure/temperature values and extreme thinness of the boundary layer, no detailed experimental data are available for typical flows in nozzles of rocket motors, and virtually no model exists for the assessment of the corresponding wall fluxes. Consequently, the present DNS results are analyzed in terms of wall function: the ability of existing laws-of-the-wall to

³ In addition, they chemically react with the carbon-coated walls of the nozzles through an ablation reaction. However, this topic will not be dealt with in this paper.

4 L. Artal and F. Nicoud

reproduce the results is first tested; then, these laws-of-the-wall are enriched thanks to the data generated by the DNS.

Knowing the mean temperature profile, the profiles of mass fractions at equilibrium can be obtained thanks to the equilibrium curves of the equivalent mixture and compared to the profiles obtained by post-processing the fields of mass fractions from the DNS. Such a comparison is made in figure 2 which shows that the hypothesis of chemical equilibrium is valid in the DNS. In terms of wall functions, it means that a law for temperature and velocity is enough to determine the wall heat flux and the shear stress.

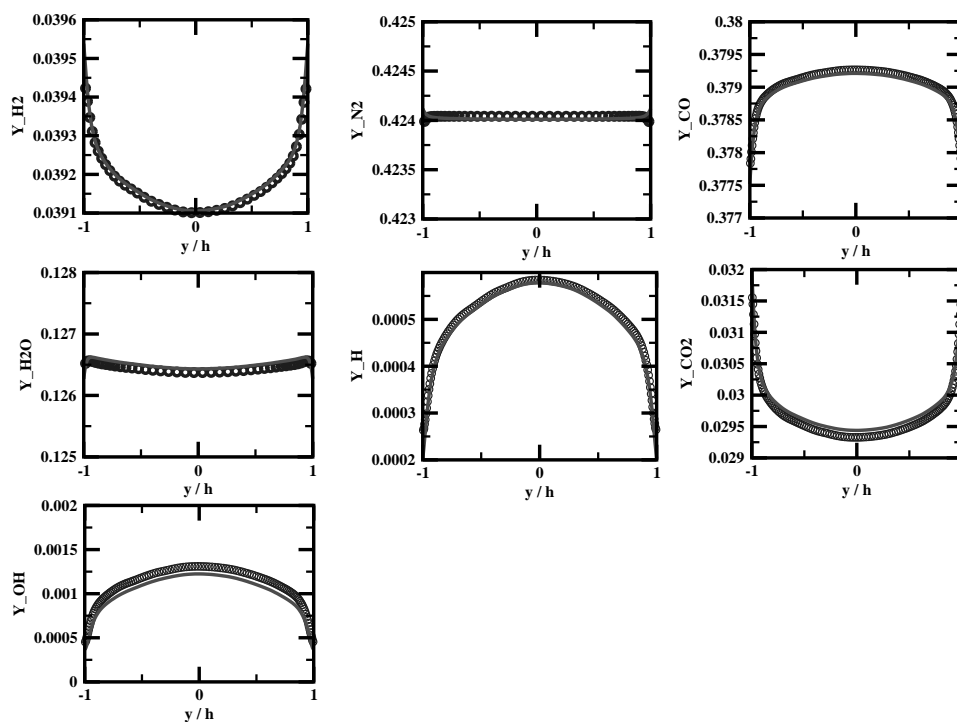


Fig. 2. Chemical equilibrium - Symbols: Mean mass fractions from the DNS; Continuous line: Mass fractions at equilibrium from the DNS temperature profile

The derivation of logarithmic wall functions usually relies on the existence of a zone with constant friction/heat flux. For the shear stress and the heat flux in the turbulent wall region, such an assumption leads to:

$$\tau_w = -\bar{\rho} \overline{u'v'} \approx \mu_t \frac{d\bar{u}}{dy} \quad (1)$$

when the Boussinesq hypothesis is applied, and to:

$$q_w = \bar{\rho} \bar{C}_p \overline{v'T'} \approx -\frac{\mu_t C_p}{Pr_t} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (2)$$

When the chemical composition evolves, the mixture features change, a heat flux related to species diffusion exists and the energy equation admits a che-

mical source term.

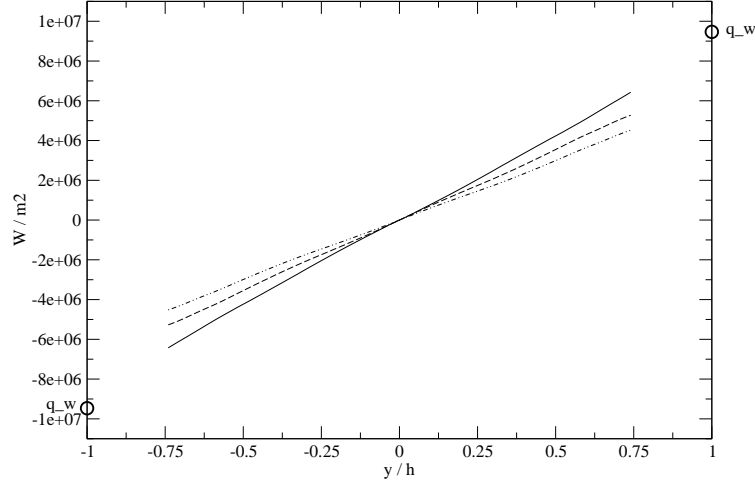


Fig. 3. Heat flux in the turbulent zone - Continuous line: Total heat flux; Dashed line: Sum of the turbulent heat flux and of the turbulent species diffusion term; Dashes and points: Turbulent heat flux

Figure 3 points out that in the turbulent zone the total heat flux can be reasonably approximated by the sum of the turbulent heat flux $\bar{\rho} \overline{C_p v' T'}$ and of the turbulent species diffusion term $\sum_{k=1}^{n.s} \bar{\rho} \overline{v' Y_k'} \Delta h_{f,k}^0$. The wall heat flux can then be obtained by extrapolating the curves up to the wall. Because of the low Reynolds number of this DNS, the Fourier term and the turbulent species diffusion term are found to be of the same order of magnitude in the turbulent zone. This explains the discrepancy noticed between the total heat flux and its approximation. However, we anticipate the Fourier term to become truly negligible when the turbulent Reynolds number is large enough. Therefore, at high Reynolds number, and when there is no forcing term, the wall turbulent zone should be characterized by:

$$\bar{\rho} \overline{C_p v' T'} + \sum_{k=1}^{n.s} \bar{\rho} \overline{v' Y_k'} \Delta h_{f,k}^0 \approx q_w \quad (3)$$

which differs from equation (2).

The classic logarithmic law does not represent the present results, as shown in figure 4 which compares the non-dimensional temperature profile T^+ given by various laws (the logarithmic law, the Kader correlation [11] and the new wall function proposed in this paper) to the one coming from DNS. T^+ is defined by $T^+ = (T_w - T)/T_\tau$, where $T_\tau = q_w/(\rho_w C_p u_\tau)$ denotes the friction temperature, q_w the wall heat flux and C_p the mixture mass heat capacity at constant pressure.

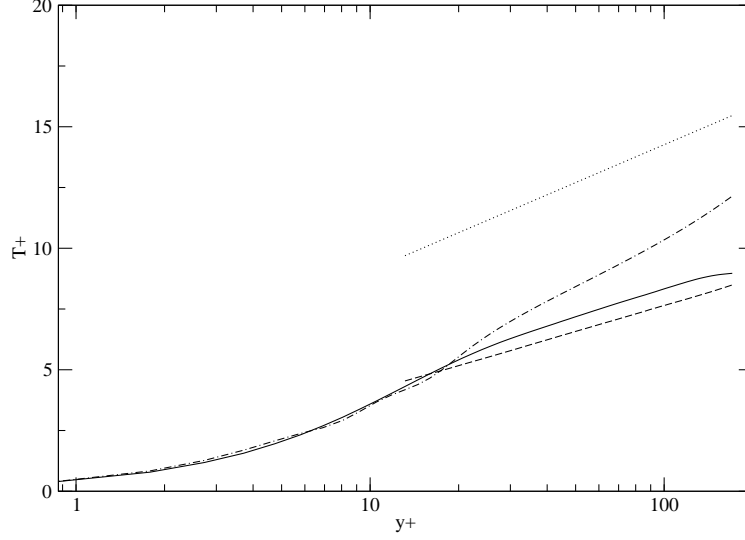


Fig. 4. T^+ profiles - Continuous line: DNS results; Dashed line: New wall function; Dashes and points: Kader correlation; Points: Logarithmic law $T^+ = (0.9/0.4)\ln y^+ + 3.9$

Two main reasons have been identified for this disagreement: a) on the contrary to the Kader correlation, the log-law does not account for variations in the molecular Prandtl number and is made for cases with molecular Prandtl number close to unity (it is 0.47 in the present study), b) even if the mixture is always close to chemical equilibrium, the heat release due to chemical reactions is sufficiently large and non uniform over space to prevent the classic constant turbulent heat flux assumption from holding and equation (3) should be used instead of (2). Although in better agreement with the DNS data than the logarithmic law, the Kader correlation does not reflect DNS because of chemistry influence.

In order to account for the chemistry effects in the wall region description, a new wall function is derived from equation (3).

The turbulent heat flux is again modeled by the classic formula:

$$\bar{\rho} \bar{C}_p \overline{v'T'} \approx -\frac{\mu_t C_p}{Pr_t} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (4)$$

The turbulent species diffusion terms must be modeled too. For each species, one makes use of the following approximation, valid under the chemical equilibrium assumption:

$$\bar{\rho} \overline{v'Y'_k} \approx -\frac{\mu_t}{Sc_{k,t}} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial \bar{X}_k}{\partial y} \approx -\frac{\mu_t}{Sc_{k,t}} \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{d\bar{X}_k}{d\bar{T}} \frac{\partial \bar{T}}{\partial y} \quad (5)$$

Writing equation (1) in terms of non-dimensional variables and integrating it,

the following logarithmic approximation is found for the Van Driest transformation [12], [13]:

$$u_{VD}^+ = \int_0^{U^+} \sqrt{\frac{\bar{\rho}}{\rho_w}} du^+ = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \quad (6)$$

Dividing equation (3) by equation (1) and injecting equations (4) and (5) yields:

$$\frac{T}{T_w} = C_1 - \alpha U^+ \quad (7)$$

with

$$\alpha = \frac{C_p B_q}{\frac{C_p}{Pr_t} + \frac{1}{W} \sum_{k=1}^{ns} \frac{1}{Sc_{k,t}} W_k \frac{d\bar{X}_k}{dT} \Delta h_{f,k}^0} \quad (8)$$

and

$$B_q = \frac{q_w}{\rho_w C_p u_\tau T_w} = -\frac{T_\tau}{T_w} \quad (9)$$

Assuming that the thermodynamic pressure is constant through the boundary layer, combination of equations (6) and (7) leads to the following coupled wall function including chemistry and sensitivity to the molecular Prandtl number:

$$\begin{cases} \frac{2}{\alpha} \left(\sqrt{C_1} - \sqrt{C_1 - \alpha U^+} \right) = \frac{1}{\kappa} \ln y^+ + C \\ T^+ = \frac{T - T_w}{T_\tau} = \frac{\alpha}{B_q} U^+ + K(Pr) \end{cases} \quad (10)$$

At this point, we still have the liberty to fix the constant of integration C_1 . To do so, we impose the wall function (10) to be coherent with the Kader correlation in the limiting case of a passive scalar. This implies $C_1 = 1 - B_q K(Pr)$, with $K(Pr) = \beta(Pr) - Pr_t C + (2.12 - (Pr_t/\kappa)) \ln(100)$ and $\beta(Pr) = (3.85 Pr^{1/3} - 1.3)^2 + 2.12 \ln(Pr)$ when we impose our wall function to give the same T^+ as the Kader correlation at $y^+ = 100$. Note that this definition makes C_1 close to unity, which is consistent with the experimental data [14].

4 Conclusion

The DNS of reacting turbulent multi-species wall-bounded flow presented in this paper provided accurate data, which highlighted the chemistry influence on the heat flux and the known sensitivity of the heat flux to the molecular Prandtl number. Thanks to these results, a new wall function which takes into account chemistry and molecular Prandtl number was derived and successfully a priori tested.

8 L. Artal and F. Nicoud

5 Acknowledgements

The authors are grateful to Snecma Propulsion Solide (Groupe SAFRAN) for supporting this work, and to the CINES (Centre Informatique National pour l'Enseignement Supérieur) for the access to supercomputer facilities.

References

1. T. J. Craft, A. V. Gerasimov, H. Iacovides, and B. E. Launder. Progress in the generalization of wall-function treatments. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, pages 148–160, 2002.
2. R. H. Nichols and C. C. Nelson. Wall function boundary conditions including heat transfer and compressibility. *AIAA Journal*, 42(6):1107–1114, June 2004.
3. P. Moin and K. Mahesh. DIRECT NUMERICAL SIMULATION: A Tool in Turbulence Research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, pages 539–578, 1998.
4. N. Kasagi and O. Iida. Progress in direct numerical simulation of turbulent heat transfer. *Proceedings of the 5th ASME/JSME Joint Thermal Engineering Conference*, March 15-19 1999.
5. J. Jiménez and P. Moin. The minimal flow unit in near-wall turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 225:213–240, 1991.
6. J. Kim, P. Moin, and R. Moser. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 177:133–166, 1987.
7. A. Ern and V. Giovangigli. *EGLIB: A General-purpose FORTRAN Library For Multicomponent Transport Property Evaluation*. CERMICS and CMAP, 2001.
8. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.
9. L. Artal. Modélisation des flux de chaleur stationnaires pour un mélange multi-espèce avec transfert de masse à la paroi, Rapport d'avancement Année 2. Technical Report CR/CFD/04/113, SNECMA-CERFACS-UMII, 2004.
10. http://www.cerfacs.fr/cfd/avbp_code.php.
11. B. A. Kader. Temperature and Concentration Profiles In Fully Turbulent Boundary Layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24(9):1541–1544, 1981.
12. E. R. Van Driest. Turbulent boundary layers in compressible fluids. *J. Aero. Sci.*, 18(3):145–160, 1951.
13. P. G. Huang and G. N. Coleman. Van Driest transformation and compressible wall-bounded flows. *AIAA Journal*, 32(10), 1994.
14. P. Bradshaw. Compressible turbulent shear layers. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 9:33–54, 1977.

Bibliographie

- [1] http://www.cerfacs.fr/cfd/avbp_code.php.
- [2] http://www.me.berkeley.edu/gri_mech.
- [3] Acurex Corporation, Aerotherm Report No. UM-72-25. *Aerotherm Graphite Surface Kinetics Computer Program, Volume 1, Program description and sample problems*, 1972.
- [4] C. Angelberger. *Contributions à la modélisation de l'interaction flamme-paroi et des flux pariétaux dans les moteurs à allumage commandé*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1997.
- [5] R. A. Antonia, M. Teitel, J. Kim, and L. Browne. Low-Reynolds number effects in a fully developed turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 236 :579–605, 1992.
- [6] C. Bailly and G. Comte-Bellot. *Turbulence*. CNRS Editions, 2003.
- [7] A. Bejan. *Convection Heat Transfer*. Wiley-Interscience Publication, Second Edition, 1995.
- [8] P. Bradshaw. Compressible turbulent shear layers. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 9 :33–54, 1977.
- [9] G. Brillant, F. Bataille, and F. Ducros. Large-eddy simulation of a turbulent boundary layer with blowing. *Theoretical and Computational Fluid Dynamics*, 17 :433–443, 2004.
- [10] M. H. Buschman and M. Gad-el Hak. Generalized Logarithmic Law and Its Consequences. *AIAA Journal*, 41(1) :40–48, 2003.
- [11] L. Caffarelli, R. Kohn, and L. Nirenberg. Partial regularity of suitable weak solutions of the Navier-Stokes equations. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 35 :771–831, 1982.
- [12] C. Canuto, M. Hussaini, A. Quarteroni, and T. Zang. *Spectral Methods in Fluid Dynamics*. Springer Series in Computational Physics. Springer Verlag, 1988.
- [13] P. Chassaing. *Turbulence en mécanique des fluides : analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l'usage de l'ingénieur*. Cépaduès, 2000.
- [14] P. Chassaing, R. A. Antonia, F. Anselmet, P ; Joly, and S. Sarkar. *Variable density fluid turbulence*. Kluwer Academic Publishers, 2002.

- [15] CHEMKIN Collection Release 3.6. *SURFACE CHEMKIN : a software package for the analysis of heterogeneous chemical kinetics at a solid-surface / gas-phase interface*, December 2001.
- [16] C. C. Chieng and B. E. Launder. On the calculation of turbulent heat transport downstream from an abrupt pipe expansion. *Numerical Heat Transfer*, 3 :189–207, 1980.
- [17] D. Chu and G. Karniadakis. A direct numerical simulation of laminar and turbulent flow over riblet-mounted surfaces. *Journal of Fluid Mechanics*, 250 :1–42, 1993.
- [18] G. Coleman, J. Kim, and R. Moser. A numerical study of turbulent supersonic isothermal-wall channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 305 :159–183, 1995.
- [19] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations. *Journal of Computational Physics*, 2000.
- [20] J. W. Cooley and J. W. Tukey. An algorithm for the machine calculation of complex fourier series. *Math. Comput.*, 19 :297–301, 1965.
- [21] J. Cousteix. *Turbulence et couche limite*. Cépaduès, 1990.
- [22] T. J. Craft, S. E. Gant, H. Iacovides, and B. E. Launder. Development and application of a new wall function for complex turbulent flows. In *ECCOMAS Computational Fluid Dynamics Conference, Swansea (Wales)*, 2001.
- [23] T. J. Craft, A. V. Gerasimov, H. Iacovides, and B. E. Launder. Progress in the generalization of wall-function treatments. *International Journal of Heat and Fluid Flow*, pages 148–160, 2002.
- [24] F. Dabireau. *Etude des transferts de chaleur aux parois dans les moteurs-fusées*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2002.
- [25] R. B. Dean. Reynolds Number Dependence of Skin Friction and Other Bulk Flow Variables in Two-Dimensional Rectangular Duct Flow. *Journal of Fluid Engineering*, 100 :215–223, 1978.
- [26] A. Ern and V. Giovangigli. *Multicomponent Transport Algorithms*. Lecture Notes in Physics, New Series Monographs, Birkhäuser, 1994.
- [27] A. Ern and V. Giovangigli. Thermal conduction and thermal diffusion in dilute polyatomic gas mixtures. *Physica, A* 214 :526–546, 1995.
- [28] A. Ern and V. Giovangigli. *EGLIB : A General-purpose FORTRAN Library For Multicomponent Transport Property Evaluation*. CERMICS and CMAP, 2001.
- [29] A. Ern and Giovangigli V. Fast and Accurate Multicomponent Transport Property Evaluation. *Journal of Computational Physics*, pages 105–116, 1995.
- [30] J. H. Ferziger and M. Perić. *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer Verlag, 1998.
- [31] S. Galera. *Modélisation thermique de la turbulence de proche paroi en régime hypersonique*. PhD thesis, Université Montpellier II, 2005.

- [32] L. Gamet, F. Ducros, F. Nicoud, and T. Poinsot. Compact Finite Difference Schemes on Non-uniform Meshes. Application to Direct Numerical Simulations of Compressible Flows. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 1999.
- [33] R. L. Geisler. The Prediction of Graphite Rocket Nozzle Recession Rates. In *JAN-NAF Propulsion Meeting, New Orleans*, volume 5, pages 173–196, 1981.
- [34] M. Germano, U. Piomelli, P. Moin, and W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. Fluids A*, 3 :1760–1765, 1991.
- [35] V. Giovangigli. *Multicomponent Flow Modeling*. Birkhäuser, 1999.
- [36] H. Ha Minh. Physique et modélisation de la turbulence. In *Ecole de Printemps de Mécanique des Fluides, Toulouse (France)*, 1993.
- [37] R. Henderson and G. Kardianakis. Unstructured spectral element methods for simulation of turbulent flows. *Journal of Computational Physics*, 122 :191–217, 1995.
- [38] J. O. Hinze. *Turbulence*. Mc Graw Hill, 1975.
- [39] J. Hirschfelder, C. Curtiss, and R. Bird. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1954.
- [40] M. Hishida, Y. Nagano, and M. Tagawa. Transport process of heat and momentum in the wall region of a turbulent pipe flow. In *Proc. of the 8th Int. Heat Transfer Conference*, volume 3, pages 925–930. Washington D. C., 1986.
- [41] P. G. Huang and G. N. Coleman. Van Driest transformation and compressible wall-bounded flows. *AIAA Journal*, 32(10), 1994.
- [42] F. P. Incropera and D. P. De Witt. *Introduction to Heat Transfer*. John Wiley & Sons, 1996.
- [43] J. Jiménez and P. Moin. The minimal flow unit in near-wall turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 225 :213–240, 1991.
- [44] W.-H. Jou and J. J. Riley. Progress in direct numerical simulations of turbulent reacting flows. *AIAA Journal*, 27(11), 1989.
- [45] B. A. Kader. Temperature and Concentration Profiles In Fully Turbulent Boundary Layers. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 24(9) :1541–1544, 1981.
- [46] N. Kasagi and O. Iida. Progress in direct numerical simulation of turbulent heat transfer. *Proceedings of the 5th ASME/JSME Joint Thermal Engineering Conference*, March 15-19 1999.
- [47] N. Kasagi, Y. Tomita, and A. Kuroda. Direct numerical simulation of the passive scalar field in a turbulent channel flow. *ASME J. Heat Trans.*, 1992.
- [48] K.C. Kays. Turbulent Prandtl Number - Where are we? *ASME J. of Heat Transfer*, 116 :284–295, 1994.
- [49] W.M. Kays, M.E. Crawford, and B. Weigand. *Convective Heat and Mass Transfer*. Mc Graw Hill, 4th edition, 2004.

- [50] R. M. Kendall, R. A. Rindal, and E. P. Bartlett. A Multicomponent Boundary Layer Chemically Coupled to an Ablating Surface. *AIAA Journal*, 5(6) :1063–1071, June 1967.
- [51] S. T. Keswani, E. Andiroglu, J. D. Campbell, and K. K. Kuo. Recession behavior of graphitic nozzles in simulated rocket motors. *AIAA Paper*, (83-1317), 1983.
- [52] S. T. Keswani and K. K. Kuo. An aerothermochemical model of carbon-carbon composite nozzle recession. *AIAA*, 83-0910, 1983.
- [53] J. Kim and P. Moin. Transport of passive scalars in a turbulent channel flow. In *Proceedings of Sixth international symposium on turbulent shear flows*, pages 85–96, Toulouse, 1987. Springer Verlag.
- [54] J. Kim, P. Moin, and R. Moser. Turbulence statistics in fully developed channel flow at low Reynolds number. *Journal of Fluid Mechanics*, 177 :133–166, 1987.
- [55] K. Klager. The Interactions of the Efflux of Solid Propellants with Nozzle Materials. *Propellants and Explosives*, 2 :55–63, 1977.
- [56] K. K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley, 1986.
- [57] Fulachier L. and R. A. Antonia. Spectral analogy between temperature and velocity fluctuations in several turbulent flows. *Int. J. of Heat and Mass Transfer*, 27(7) :987–997, 1984.
- [58] B. E. Launder and D. B. Spalding. The numerical computation of turbulent flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 3 :269–289, 1974.
- [59] L. Lees. Convective heat transfer with mass addition and chemical reactions. In *Third Agard Colloquium on Combustion and Propulsion*, pages 451–499, 1959.
- [60] S. Lele. Compact finite difference schemes with spectral-like resolution. *Journal of Computational Physics*, 103 :16–42, 1992.
- [61] M. Lesieur. *Turbulence in Fluids*. Kluwer Academic Publishers, 1997.
- [62] M. Lesieur and O. Métais. New trends in Large-Eddy Simulations of turbulence. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 28 :45–85, 1996.
- [63] B. Mohammadi. Complex Turbulent Compressible Flows Computation with a Two-Layer Approach. *Int. J. Num. Meth. for Fluids*, 15 :747–771, 1002.
- [64] P. Moin. Progress in large eddy simulation of turbulent flows. *AIAA*, 97-0749, 1997.
- [65] P. Moin and K. Mahesh. DIRECT NUMERICAL SIMULATION : A Tool in Turbulence Research. *Annual Review of Fluid Mechanics*, pages 539–578, 1998.
- [66] R. Moser, J. Kim, and N. Mansour. Direct numerical simulation of turbulent channel flow up to $Re_\tau = 590$. *Physics of Fluids*, 11(4) :943–945, 1999.
- [67] R. Moser and P. Moin. The effects of curvature in wall-bounded turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 175 :479–510, 1987.
- [68] R. H. Nichols and C. C. Nelson. Wall function boundary conditions including heat transfer and compressibility. *AIAA Journal*, 42(6) :1107–1114, June 2004.

- [69] F. Nicoud. *Prévision des transferts thermiques sur les protections thermiques d'un propulseur à propergol solide*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1993.
- [70] F. Nicoud. Effects of strong wall injection on the structure of a low-Reynolds number turbulent flow. Technical Report TR/CFD/96/56, CERFACS, 1996.
- [71] F. Nicoud. Numerical study of a channel flow with variable properties. *CTR Annual Research Briefs*, pages 289–310, 1998.
- [72] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow Turb. and Combustion*, 62 :183–200, 1999.
- [73] F. Nicoud and T. Poinso. DNS of a channel flow with variable properties. In *First International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena*, pages 697–702, Santa Barbara, USA, 1999.
- [74] F. Nicoud, J.-C. Traineau, and M. Prévost. Evolution of heat flux with mass flow rate in a subscale setup for the Ariane 5 solid rocket booster. In *2nd International Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurements, Florence (Italie)*, 1993.
- [75] S. Orszag. Numerical Methods for the Simulation of Turbulence. *Physics of Fluids*, 1969.
- [76] S. Orszag and A. Patera. A spectral element method for fluid dynamics; laminar flow in a channel expansion. *Journal of Computational Physics*, 54, 1984.
- [77] W. F. Payne. An Analysis of the C/CAN File. In *JANNAF Rocket Nozzle Technology Subcommittee Meeting, Hampton*, pages 95–121, 1980.
- [78] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. Edwards, Second Edition, 2005.
- [79] S.B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000.
- [80] L. Prandtl. Uber Flussigkeitsbewegung bei sehr kleiner Reibung. In *Internat. Math. Kongr. Heidelberg*, 1904.
- [81] W. Press, B. Flannery, S. Teukolsky, and W. Vetterling. *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, 1989.
- [82] G. Puigt. *Modélisation, étude mathématique et numérique des lois de paroi pour les écoulements à grande vitesse sur parois lisses et rugueuses*. PhD thesis, Université Montpellier II, 2001.
- [83] M. Rai and P. Moin. Direct Numerical Simulation of Transition and Turbulence in a Spatially Evolving Boundary Layer. *AIAA*, 91-1607, 1991.
- [84] M. Rai and P. Moin. Direct simulations of turbulent flow using finite-difference schemes. *Journal of Computational Physics*, 96 :15–53, 1991.
- [85] O. Reynolds. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and the law of resistance in parallel channels. *Phil. Trans. Roy. Soc.*, 174 :935–982, 1883.

- [86] R. S. Rogallo. Numerical experiments in homogeneous turbulence. Technical Report NASA-TM-81315, NASA Center for AeroSpace Information, 1981.
- [87] F.M. Rupley, R.J. Kee, and J.A. Miller. CHEMKIN-II : A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-phase Chemical Kinetics. Technical report, Sandia National Laboratories, Albuquerque, 1989.
- [88] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for incompressible flows*. Springer-Verlag, 2000.
- [89] R. Schiestel. *Les écoulements turbulents*. Hermes, 1998.
- [90] H. Schlichting. *Boundary Layer Theory*. Mac Graw-Hill, 7th edition, 2005.
- [91] T. Schönfeld and M. Rudgyard. Steady and Unsteady Flow Simulations Using the Hybrid Flow Solver AVBP. *AIAA Journal*, 37(11) :1378–1385, November 1999.
- [92] M. L. Shur, P. R. Spalart, M. Strelets, and Travin A. K. Towards the prediction of noise from jet engines. In *Engineering Turbulence Modelling and Experiments*, 2002.
- [93] R. L. Simpson. Characteristics of turbulent boundary layers at low Reynolds numbers with and without transpiration. *J. of Fluid Mechanics*, 42(4) :769–802, 1970.
- [94] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Monthly Weath. Rev.*, 91 :99–164, 1963.
- [95] A. L. Snijders, A. M. Koppius, C. Nieuwwelt, and D. A. de Vries. An experimental description of the turbulent Prandtl number in the inner boundary layer for air flow and over a flat plate. In *6th International Heat Transfer conference*, volume 2, pages 425–431. Toronto, 19..
- [96] P. R. Spalart. Direct simulation of a turbulent boundary layer up to $Re_\theta = 1410$. *Journal of Fluid Mechanics*, 187 :61–98, 1988.
- [97] P. R. Spalart. Strategies for turbulence modelling and simulations. In *4th Int. Symp. Eng. Turb. Modelling and Measurements*, 1999.
- [98] P. R. Spalart, W-H. Jou, M. Strelets, and S. R. Almaras. Comments on the feasibility of LES for wings and on a hybrid rans/les approach. In *Advances in DNS/LES*. Proc. 1st AFSOR International Conference on DNS/LES. Louisiana Tech University, 1997.
- [99] Y. Sumitani and N. Kasagi. Direct numerical simulation of turbulent transport with uniform wall suction and injection. *AIAA Journal*, 33 :1220–1228, 1995.
- [100] E. R. Van Driest. Turbulent boundary layers in compressible fluids. *J. Aero. Sci.*, 18(3) :145–160, 1951.
- [101] E. R. Van Driest. On turbulent flow near a wall. *AIAA Journal*, 23(11), 1956.
- [102] T. von Kàrmàn. Turbulence and Skin Friction. *Journal of the Aeronautical Sciences*, 1(1) :47–66, January 1934.
- [103] T. Wei and W. W. Willmarth. Reynolds-number effects on the structure of a turbulent channel flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 204 :57–95, 1989.
- [104] F. White. *Viscous Flow*. Mc Graw-Hill, 1991.
- [105] S. Zhang and C. J. Rutland. Premixed flame effects on turbulence and pressure-related terms. *Combustion & Flame*, 102(3) :447–461, 1995.

Afin d'assurer l'intégrité des tuyères des moteurs-fusées à propergol solide, des calculs précis de flux thermiques pariétaux s'avèrent nécessaires. Ils permettent d'optimiser le dimensionnement thermo-ablatif des matériaux isolants et protecteurs dont sont revêtues les parois des tuyères. Cette étude vise à améliorer la prédiction des flux pariétaux au niveau de telles tuyères, par l'approche de type haut-Reynolds. Cela nécessite la définition de nouvelles lois de paroi intégrant les spécificités de ces écoulements : forts gradients de température, nombre de Mach potentiellement élevé, composition chimique variable et transfert de masse à la paroi dû à l'ablation. Cette thèse est consacrée aux deux derniers points.

Des simulations numériques directes d'écoulements turbulents, gazeux, multi-espèces, réactifs, compressibles, en canal plan tridimensionnel avec parois inertes, puis parois ablatées, sont effectuées. Des bases de données précises et détaillées, non accessibles par des mesures expérimentales du fait de l'extrême minceur de la couche limite et des niveaux élevés de pression et température, sont ainsi générées. Elles permettent de développer des lois de paroi tenant compte de tous les phénomènes importants se produisant dans la zone pariétale. Il s'agit de lois de paroi couplées vitesse-température à bas Mach, qui intègrent les effets de l'hétérogénéité du mélange gazeux et des variations du nombre de Prandtl moléculaire. Une extension de ces modèles à des nombres de Mach élevés est également proposée.

Titre en Anglais : Steady heat fluxes modeling with mass addition at the wall for a multi-species mixture

To ensure the integrity of solid propulsion rocket nozzles, accurate computations of parietal thermal fluxes are necessary. They permit to optimize the design of insulating and protective materials that cover the nozzles walls. The aim of this study is to improve the prediction of parietal fluxes for such nozzles, with a high-Reynolds number approach. This requires to define new laws of the wall integrating the distinctivenesses of such flows : high temperature gradients, potentially high Mach number, varying chemical composition and mass transfer to the wall due to ablation. This thesis is devoted to both last points.

Direct numerical simulations of compressible, reactive, multi-species, gaseous, turbulent flows in three-dimensional plane channel with inert walls, then with ablative walls, are performed. That is how accurate and detailed data bases, not available by experimental measurements because of extreme thinness of the boundary layer and of the high levels of pressure and temperature, are generated. They permit to develop laws of the wall that take into account all the important phenomena occurring in the parietal zone. It deals with velocity-temperature coupled laws of the wall, at low Mach number, that integrate the effects of mixture heterogeneity and molecular Prandtl number fluctuations. An extent of these models to high Mach numbers is proposed too.

Mots-clés : Transferts pariétaux, Simulation Numérique Directe, Ablation, Lois de paroi, Cinétique chimique.
