



HAL
open science

Modélisation de l'auto-inflammation et de la combustion pour les moteurs Diesel

Antonio Pires da Cruz

► **To cite this version:**

Antonio Pires da Cruz. Modélisation de l'auto-inflammation et de la combustion pour les moteurs Diesel. Energie électrique. Université Pierre et Marie Curie - Paris VI, 1997. Français. NNT : . tel-00440040

HAL Id: tel-00440040

<https://theses.hal.science/tel-00440040>

Submitted on 9 Dec 2009

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

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

THÈSE

PRÉSENTÉE

*EN VUE DE L'OBTENTION DU TITRE DE DOCTEUR
DE L'UNIVERSITÉ PIERRE ET MARIE CURIE - PARIS VI*

Spécialité: Mécanique et Énergétique

Laboratoire d'accueil: IFP

PAR

António PIRES DA CRUZ

Sujet de la thèse:

MODÉLISATION DE L'AUTO-INFLAMMATION ET DE LA COMBUSTION POUR LES MOTEURS DIESEL

soutenue le 9 décembre 1997 devant le jury composé de:

<i>MM.</i>	<i>J. JULLIEN</i>	<i>Président</i>
	<i>D. VEYNANTE</i>	<i>Rapporteur</i>
	<i>L. VERVISCH</i>	<i>Rapporteur</i>
	<i>N. PETERS</i>	<i>Examineur</i>
	<i>B. DILLIES</i>	<i>Examineur</i>
	<i>T. POINSOT</i>	<i>Examineur</i>
	<i>T. BARITAUD</i>	<i>Examineur</i>

MODÉLISATION DE L'AUTO-INFLAMMATION ET DE LA COMBUSTION POUR LES MOTEURS DIESEL

António Pires da Cruz

-
Institut Français du Pétrole
1 et 4 Av. Bois Préau, 92852 Rueil-Malmaison

-
Université Pierre et Marie Curie - Paris 6
4, Place Jussieu, 75252 Paris cedex 05

Résumé

Le travail porte sur la modélisation de l'auto-inflammation et de la combustion dans les moteurs Diesel. L'accent est mis sur la prise en compte des effets induits par la turbulence. Seule l'injection de carburant gazeux est considérée. Le mélange turbulent est identifié comme un des paramètres important contrôlant l'auto-inflammation dans les moteurs Diesel alors que les effets turbulents sont en général négligés par les modèles utilisés actuellement dans les codes de calcul moteur. Un nouveau modèle est proposé, dont le développement s'est appuyé sur des résultats de simulations numériques directes (DNS). Il prend en compte le mélange turbulent au travers de la dissipation scalaire et de *pdf* présumées de la fraction de mélange et d'une variable de progrès de la réaction chimique. Le modèle est validé à plusieurs niveaux. Tout d'abord, il est comparé aux DNS pour des cas de mélange simple. Puis, sa version moyennée est implantée dans le code de calcul KIVA2-MB où son comportement est testé en mono-dimensionnel et comparé à d'autres formulations. Enfin, le modèle est validé par comparaison avec une expérience dédiée d'injection de méthane dans une cellule pressurisée remplie d'air chauffé et permettant l'utilisation de diagnostics optiques.

Mots Clés

Moteur Diesel, Combustion turbulente, Auto-inflammation, Modélisation, Simulation numérique directe

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier M. Jaques Jullien, professeur à l'Université Pierre et Marie Curie, Paris 6, qui a accepté de présider le jury.

J'exprime ma gratitude à M. Luc Vervisch, professeur à l'INSA de Rouen, ainsi qu'à M. Denis Veynante, chercheur au laboratoire EM2C de l'Ecole Centrale de Paris, qui ont bien voulu accepter d'être les rapporteurs de ce travail. En outre, je suis très reconnaissant à M. Denis Veynante de la possibilité qu'il m'a offerte de travailler au laboratoire EM2C pendant l'été 96.

Je remercie M. Norbert Peters, professeur à l'ITM de Aachen et M. Bruno Dillies, ingénieur chez PSA qui m'ont fait l'honneur d'être membres du jury.

Je remercie Thierry Poinot qui a dirigé ce travail. Son expérience et sa culture scientifique m'ont été précieuses. Il m'a initié au monde de la combustion et a toujours apporté des critiques constructives à mon travail.

Je tiens à remercier Thierry Baritaud qui m'a accueilli dans son équipe. Il m'a toujours soutenu pendant ces trois années passées à l'IFP grâce à ses connaissances scientifiques très étendues et à sa toujours présente bonne humeur.

Je remercie M. Philippe Pinchon, directeur de la division Techniques d'Applications Energétiques, de m'avoir accordé tous les moyens nécessaires au bon déroulement de mes recherches et M. Pierre Eyzat, principal responsable de ma présence à l'IFP.

Merci à Jean Marc Duclos qui dès son arrivée à l'IFP s'est vivement intéressé à ce travail et à Arnaud Torres qui m'a initié aux joies de KIVA. Avec Chawki Habchi, ils ont toujours été disponibles pour m'aider à résoudre les problèmes de ce code. Merci à Nondas Mastorakos pour sa collaboration et son amitié. Eric Van Kalmthout m'a initié au monde de la DNS. Je suis très reconnaissant pour tout le temps qu'il a mis à ma disposition. Merci à Bruno Algorithme pour son efficacité et sa compétence technique et à Hicham Boughanem, mon collègue de bureau pour les discussions pratiques et scientifiques au long de ces trois années.

Toute ma gratitude aux membres des équipes CRAM et MCM pour leur soutien et leur intérêt permanent.

Merci à toute ma famille et à la famille Bodilis pour leur amitié et pour tous les moments de détente passés auprès d'eux et tout particulièrement à Jocelyne pour ses corrections de français qui m'ont été très précieuses.

Ce travail a été financé par l'Institut Français du Pétrole et par l'Ecole Nationale Supérieure du Pétrole et des Moteurs et en partie par la Commission Européenne dans le cadre du programme Joule 3 PRIDE JOF3CT950011 (Daimler Benz, CD, CERFACS, IWR Heidelberg, IFP).

à Solen

Table des matières

1	Introduction	1
1.1	La combustion dans les moteurs Diesel	1
1.2	Objectifs	3
1.3	Modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel	4
2	Revue et tests des modèles de combustion Diesel	7
2.1	Introduction	7
2.2	Modélisation de l'auto-inflammation	8
2.2.1	Modèles cinétiques d'auto-inflammation des hydrocarbures	8
2.2.2	Quelques modèles cinétiques existant	10
2.2.3	Calculs avec le modèle IFP	13
2.2.4	Influence de la turbulence sur l'auto-allumage	19
2.3	Modèles à scalaire passif pour la flamme établie	21
2.3.1	Etablissement des équations de transport du scalaire conservé	22
2.3.2	Autres scalaires conservés	23
2.3.3	Détermination des concentrations et des grandeurs thermodynamiques en fonction de la fraction de mélange	25
2.3.4	Etude probabiliste des flammes de diffusion	27
2.4	Modélisation à l'aide de flammelettes laminaires	32
2.4.1	Flammelettes en combustion prémélangée	32
2.4.2	Modèles de flammelettes en combustion prémélangée	35
2.4.3	Flammelettes et combustion non prémélangée	40
2.4.4	Modélisation de la combustion dans un moteur Diesel	46
2.5	Modèle à trois équations de transport de surface	51
2.5.1	Conception du modèle	51
2.5.2	Equations de transport des densités de surface	53
2.5.3	Modélisation des termes source des équations de transport de Σ	54
2.5.4	Validité du modèle 3CFM	56
2.5.5	Conclusion	60
2.6	Conclusion	61
3	Modélisation du taux de réaction	63
3.1	Introduction	63
3.2	Mélange turbulent non réactif	66
3.2.1	Grandeurs étudiées et procédure	66
3.2.2	Modèles pour le calcul de la fraction des espèces prémélangées	67
3.2.3	Détermination des <i>pdf</i> de mélange	69
3.2.4	Conclusion	70

3.3	Mélange turbulent avec combustion: Modélisation	71
3.3.1	Introduction	71
3.3.2	Formulation du modèle PDFA	71
3.3.3	Chimie non infiniment rapide	75
3.3.4	Extension du modèle PDFA à un modèle mixte pdf/flammelettes	77
3.3.5	Le couplage PDFA/CHI	79
3.4	Conclusion	80
4	Validation des modèles et comparaisons avec la DNS	81
4.1	Introduction	81
4.2	Résultats de simulation directe mis à disposition	83
4.2.1	Couche de mélange spatiale: Données de Van Kalmthout	83
4.2.2	Couche de mélange temporelle: Données de Mastorakos	84
4.3	Validation des modèles de mélange non réactif	86
4.3.1	Equation de transport du mélange moyen $\overline{Y_F Y_O}$	86
4.3.2	Test des modèles algébriques de mélange	91
4.3.3	Test du modèle de mélange à <i>pdf</i> présumées	91
4.3.4	Test des hypothèses du modèle de mélange à surface de contact	92
4.3.5	Conclusion	94
4.4	Modèle PDFA/CHI: Tests sur couche de mélange spatiale	97
4.4.1	Tests sur la variable d'avancement <i>c</i> et sur les <i>pdf</i> de <i>c</i> et de <i>Z</i>	97
4.4.2	Résultats obtenus avec le modèle PDFA	101
4.4.3	Résultats obtenus avec le modèle CHI	109
4.4.4	Détermination de la fonction de pondération PDFA/CHI	110
4.5	Modèle PDFA/CHI: Tests sur couche de mélange temporelle	112
4.6	Discussion et développement	113
4.6.1	Validité des simulations DNS utilisées	113
4.6.2	D'autres restrictions liées aux calculs DNS	115
5	Intégration du modèle PDFA/CHI dans un code RANS 1D	119
5.1	Introduction	119
5.2	Tests 1D	121
5.2.1	Description du problème	121
5.2.2	Sensibilité du modèle PDFA/CHI par rapport aux paramètres numériques et physiques	122
5.2.3	Comparaison avec un modèle traditionnel	130
5.2.4	Comparaison avec les résultats de simulation numérique directe de couche de mélange temporelle	133
5.3	Conclusion	137
6	Validation expérimentale et tests 2D	139
6.1	Introduction	139
6.2	Montage expérimental	141
6.3	Procédure expérimentale et résultats	143
6.3.1	Caractérisation de l'injecteur	143
6.3.2	Masse injectée	145
6.3.3	Caractéristiques du jet gazeux	147
6.3.4	Auto-inflammation des jets de méthane	149
6.4	Tests 2D	154

6.4.1	Description du problème	154
6.4.2	Discretisation du domaine de calcul	155
6.4.3	Calculs effectués	155
6.5	Conclusion	162
7	Conclusions et perspectives	163
A	Calcul de la flamme laminaire étirée et stationnaire	165
A.1	Approche sans scalaire passif	166
A.1.1	Résolution des champs de concentrations, Y_F et Y_O	166
A.1.2	Détermination de Y_F	167
A.1.3	Détermination de Y_O	167
A.1.4	Détermination de la température	168
A.1.5	Détermination de la position de la flamme x_f	168
A.1.6	Température de la flamme	170
A.1.7	Bibliothèques de flammelettes	170
A.1.8	Résumé des résultats importants	171
A.2	Calculs à partir d'un scalaire passif	172
A.2.1	Détermination de Y_F et de Y_O	172
A.2.2	Détermination de la position de la flamme x_f	173
A.3	Calculs à densité variable	174
A.4	Vitesses caractéristiques à travers la surface de contact	175
B	Implantation et calculs avec le modèle 3CFM	179
B.1	introduction	179
B.2	Equations du modèle 3CFM	179
B.2.1	Transport des espèces réactives	179
B.2.2	Modélisation des taux de réaction moyens	180
B.2.3	Augmentation de l'énergie interne	186
B.3	Calculs effectués	186
B.3.1	Etude de l'évolution au cours du temps des paramètres physiques	187
B.3.2	Sensibilité du modèle aux variations de maillage	196
B.3.3	Sensibilité du modèle aux changements de la production des différentes surfaces	197
B.3.4	Sensibilité du modèle à l'initialisation des grandeurs turbulentes	200
B.3.5	Sensibilité du modèle à l'initialisation de la surface de contact	204
B.4	Conclusion	206
C	Influence du nombre de Damköhler	207
D	Méthode d'intégration numérique	211
D.1	Test de précision	211
D.2	Test de convergence	211
E	Analyse de sensibilités	213
E.1	Modèle PDFA	213
E.1.1	Augmentation de \bar{c}	213
E.1.2	Changement de $Y_f(Z, \bar{c})$	215
E.1.3	Augmentation du nombre de Damköhler	215
E.2	Couplage PDFA/CHI	215

Nomenclature

Lettres romaines

Symbole	Signification	Unités
\bar{a}	Valeur moyenne au sens de Reynolds de la variable générique a	-
\tilde{a}	Valeur moyenne au sens de Favre de la variable générique a	-
A	Constante pré-exponentielle dans l'expression d'Arrhenius	s^{-1}
c	Variable d'avancement de la réaction chimique ($0 \leq c \leq 1$)	-
C_D	Constante liée au modèle de dissipation scalaire moyenne	-
C_P	Capacité calorifique à pression constante	$J kg^{-1}K^{-1}$
C_V	Capacité calorifique à volume constant	$J kg^{-1}K^{-1}$
C_∞	Vitesse du son $m s^{-1}$	-
D	Coefficient de diffusion laminaire	$m^2 s^{-1}$
Da	Nombre de Damköhler	-
E_a	Energie d'activation d'une réaction chimique	$J kg^{-1}$
k	Energie cinétique turbulente	$m^2 s^{-2}$
Ka	Nombre de Karlowitz	-
l_f	Epaisseur de flamme laminaire	m
l_t	Longueur intégrale turbulente	m
L	Longueur des domaines de calcul DNS	m
Le	Nombre de Lewis	-
p	Pression	bar
$P(X)$	Fonction densité de probabilité jointe du vecteur de variables X	-
Q	Pouvoir calorifique	$J kg^{-1}$
r	Coefficient massique stœchiométrique de la réaction entre F et O	-
R	Constante universelle des gaz parfaits $R = 8.3143 kJ/kmol K$	$J kg^{-1}K^{-1}$
Re	Nombre de Reynolds	-
S_l	Vitesse de flamme laminaire	$m s^{-1}$
t	Temps	s
T	Température	K
T_a	Température d'activation d'une réaction chimique	K
T_{ad}	Température adiabatique de flamme	K
u_k	Composante k du vecteur vitesse (u, v, w)	$m s^{-1}$
U	Vitesse moyenne d'un écoulement	$m s^{-1}$
V	Taux de consommation volumique par unité de surface de flamme	$m s^{-1}$
x_k	Composante k du vecteur position (x, y, z)	m
X_j	Concentration volumique de l'espèce j	-
Y_j	Concentration massique de l'espèce j , $Y_j = \rho_j/\rho$	-
Z	Fraction de mélange	-

Lettres grecques

Symbole	Signification	Unités
β_i	Coefficients de Shvab-Zeldovich	-
γ	Rapport entre les capacités calorifiques d'un gaz (C_P/C_V)	-
ϵ	Taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente	$m^2 s^{-3}$
λ	Conductivité thermique	$W m^{-1} K^{-1}$
Λ	Étirement	s^{-1}
μ	Viscosité	$kg m^{-1} s^{-1}$
ν	Viscosité cinématique, $\nu = \mu/\rho$	$m^2 s^{-1}$
ρ	Densité (masse volumique)	$kg m^{-3}$
Σ	Densité de surface de flamme	m^{-1}
τ	Temps caractéristique ou de référence	s^{-1}
ϕ	Richesse, $\phi = r Y_F/Y_O$	-
χ	Taux de dissipation scalaire	s^{-1}
$\dot{\omega}$	Taux de réaction massique	$kg m^{-3} s^{-1}$

Indices et exposants

Symbole	Signification
<i>al</i>	Variables relatives aux calculs avec le modèle d'auto-allumage PDF/A
<i>b</i>	Correspondant aux gaz brûlés
<i>c</i>	Correspondant à la surface de contact
<i>ch</i>	Correspondant aux conditions dans la chambre de combustion
<i>d</i>	Grandeur non prémélangée
<i>dif</i>	Variables relatives à la flamme de diffusion
<i>DNS</i>	Variables relatives aux calculs DNS
<i>ed</i>	Correspondant à l'éirement critique d'extinction
<i>eq</i>	Variables en équilibre chimique
<i>f</i>	Correspondant à la position de la flamme
<i>F</i>	Carburant
<i>inj</i>	Correspondant aux conditions de l'injection
<i>j</i>	Espèce chimique
<i>k</i>	Vecteur (x, y, z) de directions dans l'espace
<i>kl</i>	Echelles de Kolgomorov
<i>mel</i>	Variables relatives à l'écoulement non réactif
<i>mod</i>	Variables modélisées
<i>O</i>	Oxydant
<i>p</i>	Grandeur prémélangée
<i>P</i>	Produits
<i>ref</i>	Variables de référence
<i>st</i>	Correspondant à la stœchiométrie
<i>t</i>	Grandeur turbulente
<i>u</i>	Correspondant aux gaz frais
<i>l</i>	Fluctuation correspondant à une moyenne de Reynolds
"	Fluctuation correspondant à une moyenne de Favre
,0	Valeurs loin de la zone de réaction (valeurs limites à l'infini)
+	Grandeurs adimensionnelles (simulations DNS)
<i>∞rap</i>	Variables relatives à une chimie infiniment rapide

Chapitre 1

Introduction

La vaste utilisation dans l'industrie des transports des moteurs Diesel justifie les importants moyens de recherche qui lui sont dédiés. Le principe de la combustion Diesel est bien adapté à toute sorte d'applications où un bon rendement mécanique est exigé: Transport terrestre et maritime, génération d'électricité...

Cependant, à l'heure actuelle, deux problèmes se posent concernant l'utilisation de machines à combustion interne dont le moteur Diesel fait partie: D'un côté, des efforts pour diminuer la consommation des combustibles sont exigés et de l'autre côté, les normes antipollution deviennent de plus en plus strictes. La survie des moteurs à combustion interne passe donc par l'amélioration de la compréhension de leur fonctionnement.

L'apparition des catalyseurs des gaz d'échappement a contribué à la résolution d'une partie des problèmes d'émissions des moteurs à allumage commandé. Les moteurs Diesel, même si à la base ils émettent moins de hydrocarbures non brûlés et moins de monoxyde de carbone que les moteurs à allumage commandé, en contrepartie, ils produisent beaucoup plus de particules et possèdent des conditions très favorables à la formation d'oxydes d'azote.

La maîtrise du fonctionnement de ce type de systèmes, vis à vis de la réduction des consommations et des émissions polluantes, ne peut être atteinte qu'à l'aide d'importants moyens de recherche appliquée aux mécanismes de la combustion (moyens expérimentaux et numériques). Une combustion efficace implique la réduction à la source de la production de polluants, ainsi que l'amélioration de la consommation.

1.1 La combustion dans les moteurs Diesel

La figure 1.1 représente de façon schématique l'intérieur de trois chambres de combustion typiques de moteurs Diesel à injection directe. Dans ce type de moteurs, l'air est admis à l'intérieur de la chambre de combustion et est ensuite comprimé par un piston. Proche du point mort haut (voir figure 1.1), le carburant, en général sous forme liquide, est injecté à grande vitesse dans la chambre de combustion où l'air est à haute pression et température. Le carburant s'atomise et s'évapore créant ainsi avec l'air dans la chambre un mélange stratifié inflammable. La figure 1.2 permet de suivre les différents mécanismes caractéristiques de la phase de combustion.

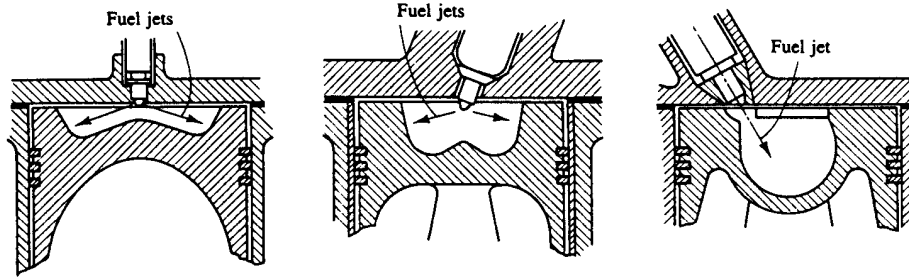


Figure 1.1 : Différentes sortes de chambres de combustion caractéristiques de moteurs Diesel à injection directe. D'après Heywood.

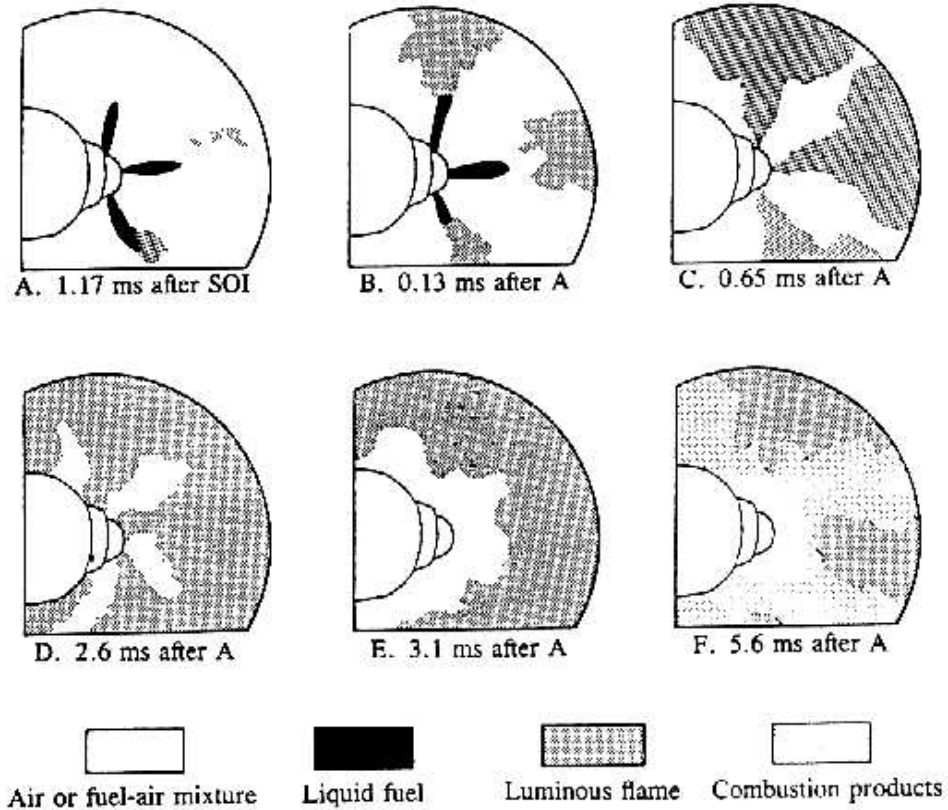


Figure 1.2 : Images des frontières des jets de carburant liquides et des flammes à partir de films réalisés à haute vitesse sur la combustion dans les moteurs Diesel. Premier point lumineux à 1.17 ms après le début de l'injection (SOI). D'après Heywood.

Une partie du carburant et de l'air qui ont pu se mélanger, se trouvent dans les conditions idéales pour subir un processus d'auto-inflammation. Les principaux paramètres qui contrôlent le délai d'auto-allumage (temps entre le début de l'injection et le début de la combustion) sont la température et la pression dans la chambre lors de l'injection, la pression d'injection et le type de carburant utilisé. Pendant cette phase, le temps caractéristique des réactions chimiques est long par rapport au temps de mélange entre le carburant et l'air.

Lorsque la température est suffisamment élevée, les réactions chimiques de combustion deviennent très rapides par rapport aux temps caractéristiques de formation du mélange air-carburant. La phase de combustion complètement développée débute à partir de points isolés d'auto-allumage avec la propagation d'une flamme aux zones inflammables du mélange. Celui-ci est rapidement consommé avec un très fort dégagement d'énergie (figure 1.3 [1]). Une flamme de diffusion turbulente s'établit ensuite à l'interface oxydant-carburant.

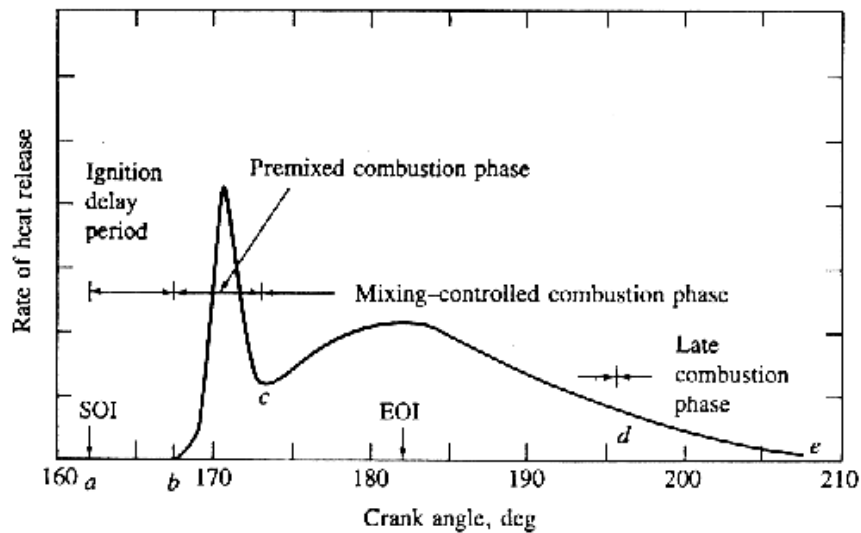


Figure 1.3 : Dégagement de chaleur en fonction du temps après le début de l'injection. Effet de la variation de la température initiale de l'air. D'après Heywood.

1.2 Objectifs

Nous avons parlé précédemment des moyens expérimentaux et numériques de recherche appliqués à la combustion Diesel. Ce travail concerne l'aspect numérique. L'objectif est la modélisation de la combustion Diesel. Sa complexité vient du fait que plusieurs phénomènes de nature très distincte coexistent dans la chambre de combustion du moteur et doivent être traités ensemble. Nous nous intéressons aux phases de mélange d'un combustible sous forme gazeuse avec un oxydant et au traitement des réactions chimiques de combustion qui suivent. La combustion dans un moteur Diesel est un phénomène de nature turbulente, ce qui ajoute de la complexité au problème qui doit alors être traité de façon moyenne.

Ce travail est structuré de la façon suivante:

- Dans le chapitre 2, une étude est effectuée sur les différents modèles de combustion Diesel

qui sont le plus couramment utilisés. Parmi eux, nous trouvons des modèles pour la phase d'auto-inflammation et pour la phase de combustion à haute température.

- Le chapitre 3 est dédié à la description du modèle de combustion Diesel proposé. Une attention spéciale est portée à l'étude du mélange turbulent air-combustible.
- Dans le chapitre 4, des simulations numériques directes d'écoulements réactifs dans des configurations simples mais représentatives des systèmes étudiés sont exploitées. L'objectif est l'analyse et les tests du modèle de combustion Diesel proposé, ainsi que les hypothèses sur lequel il est fondé.
- Dans le chapitre 5, l'implantation du modèle de combustion proposé dans un code à vocation industrielle est décrite. Des cas test sont calculés sur une version unidimensionnelle de ce code de manière à bien comprendre son fonctionnement.
- Enfin, dans le chapitre 6, le modèle implanté dans le code de calcul industriel est utilisé pour simuler des configurations proches de celles rencontrées dans un moteur Diesel. Ces configurations correspondent à l'auto-inflammation et à l'établissement d'une flamme d'un jet de carburant, injecté à grande vitesse dans une cellule de combustion haute pression. Les expériences effectuées avec cette cellule sont décrites et les résultats servent à la validation du modèle.

1.3 Modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel

L'approche classique pour résoudre les problèmes liés à la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel est la séparation du mécanisme global de combustion (mélange, allumage de la flamme et son établissement avec consommation des réactifs) en étapes plus simples. Ces étapes sont traitées séparément. Elles se différencient par des échelles caractéristiques propres (par exemple, des échelles de temps) et un modèle est utilisé pour traiter chacune d'entre elles. La liaison et la continuité entre les différents modèles est en général l'étape la moins évidente de ces méthodes. La solution de ce problème implique la conception de modèles globaux qui traitent de façon intégrée tous les mécanismes intervenant.

Une autre difficulté concernant les modèles de combustion et surtout, ceux que l'on veut appliquer à l'étude des chambres de combustion de moteurs à piston, est leur universalité. En général, plusieurs constantes apparaissent dans les différents modèles. Ces constantes sont rarement applicables à toutes les géométries et à toutes les données physiques. Ceci vient du fait que des échelles turbulentes très différentes caractérisent les systèmes. Or, les grandes échelles dépendent normalement de la géométrie des domaines étudiés. Il est difficile de s'affranchir de ce problème. La solution passe par la modélisation aux petites échelles et la résolution exacte des plus grandes. Il s'agit des méthodes LES qui en sont encore à leurs premiers pas dans le domaine des moteurs et qui ne sont pas utilisées dans ce travail.

La modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel est classiquement traitée en deux étapes distinctes: D'abord un module d'auto-allumage est utilisé. Pendant cette période, le temps caractéristique des réactions chimiques est plus élevé que le temps caractéristique du mélange turbulent. Une fois que la température est suffisamment élevée, un module de combustion complètement développée s'applique. Les réactions chimiques sont alors très rapides par rapport au temps de mélange des réactifs. La transition entre les deux modules constitue un des problèmes majeurs de la modélisation de la combustion Diesel.

Le processus de modélisation développé ici contient plusieurs niveaux de complexité. D'abord, un modèle complet du taux de réaction moyen caractéristique de la combustion Diesel, va être proposé. Il est issu de considérations physiques et de l'observation de résultats expérimentaux et de simulation numérique directe. Ce modèle, ainsi que ses hypothèses, sont testés non pas par rapport à une expérimentation mais par rapport à des résultats de simulation numérique directe. Ces tests constituent un premier niveau de modélisation du taux de réaction moyen. En effet, une partie des données dont le modèle a besoin est mesurée ou calculée directement à partir des résultats de la simulation. Un deuxième niveau de modélisation est atteint avec l'implantation du modèle dans une version unidimensionnelle d'un code de calcul moyen. En général, la résolution d'un écoulement turbulent dans un code moyen demande l'application d'un modèle de turbulence. Dans cette version 1D, les différentes grandeurs turbulentes sont imposées et constantes pendant la durée du calcul. Enfin, dans le troisième niveau de modélisation, toutes les grandeurs qui interviennent dans la formulation du modèle sont soit elles mêmes modélisées, soit calculées à partir de leurs équations de transport. La figure 1.4 résume les trois différents niveaux de manière schématique.

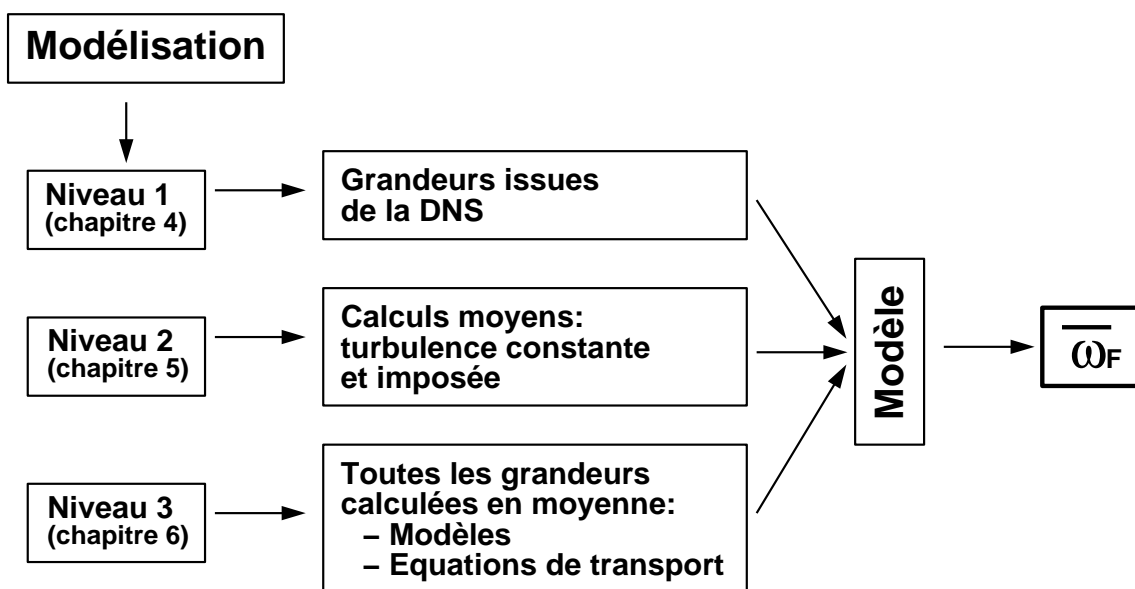


Figure 1.4 : Les différents niveaux de complexité de la modélisation de la combustion utilisés dans ce travail.

Chapitre 2

Revue et tests des modèles de combustion Diesel

2.1 Introduction

La combustion dans un moteur Diesel débute à partir d'un processus d'auto-allumage au sein de réactifs partiellement prémélangés. L'auto-inflammation se distingue de la combustion établie par des différences entre les mécanismes qui contrôlent les réactions chimiques. La température est le principal paramètre responsable de ces différences. Que la température soit faible pendant l'auto-inflammation ou élevée après implique un différent traitement numérique du problème. Ceci est dû au changement des échelles caractéristiques des phénomènes à modéliser.

Dans un moteur Diesel, l'écart entre les limites inférieure et supérieure de température de fonctionnement est important. En effet, les phénomènes qui règlent la combustion d'un hydrocarbure lors de son entrée dans la chambre de combustion, où la température de l'oxydant est de l'ordre de 1000 K , sont distincts de ceux qui se déroulent quand la flamme est établie et que la température atteint des valeurs proches de la température adiabatique de combustion (environ 2500 K dans des conditions Diesel typiques). A basse température, les taux de réaction sont faibles. Il faut tenir compte de la cinétique chimique et des différentes réactions de décomposition du carburant. La formation de radicaux est lente. Les radicaux sont des espèces chimiques très réactives, responsables du déroulement de la combustion. Ce n'est que quand la température commence à monter de façon appréciable, que la formation et la ramification des radicaux ont lieu. Alors, le mélange entre le carburant et l'oxydant devient très réactif, ce qui implique plus de dégagement de chaleur, des températures plus élevées et donc, des réactions très rapides, bien établies. Les modèles qui traitent l'un ou l'autre de ces mécanismes doivent tenir compte de ces différences.

Dans ce chapitre, les modèles existant, utilisés pour calculer l'allumage, ainsi que les modèles appliqués à la combustion à haute température dans un moteur Diesel, sont décrits. Parmi ces derniers, nous nous intéressons aux modèles du type scalaire passif. Nous allons ensuite étudier comment ils peuvent être couplés au concept de flammelettes laminaires, de manière à résoudre le problème de l'interaction entre la chimie et la turbulence, caractéristique des flammes turbulentes. Enfin, quelques modèles de combustion Diesel traditionnellement utilisés sont présentés.

2.2 Modélisation de l'auto-inflammation

Le délai d'auto-allumage caractéristique d'un moteur Diesel peut être défini comme étant: "le temps nécessaire pour qu'une augmentation importante de la température s'observe". Il s'agit d'une définition subjective, car il faut quantifier cette augmentation. La pente très forte de la courbe de température en fonction du temps lors de l'auto-allumage, due à la nature exponentielle du processus, aide à la résolution de ce problème. D'autres définitions peuvent être trouvées dans la littérature, en fonction par exemple, de l'augmentation de la pression ou en fonction de l'augmentation du taux de réaction. Cependant, la grande vitesse à laquelle le processus d'auto-inflammation se déroule, implique que toutes ces définitions aboutissent à peu près aux mêmes valeurs.

Dans un moteur Diesel, où le carburant est introduit en phase liquide, deux types de phénomènes distincts et simultanés contrôlent le temps d'auto-allumage. D'un côté, il y a l'évaporation des gouttelettes et son mélange en phase gazeuse avec l'oxydant (mécanisme physique). De l'autre, il y a l'augmentation lente de la température jusqu'à l'instant d'auto-allumage, conditionnée par l'énergie d'activation des réactions en étude (mécanisme chimique). Dans ce travail, nous ne nous intéressons qu'aux mécanismes de mélange en phase gazeuse et à la cinétique chimique. L'étude des jets liquides et de l'évaporation du carburant correspond à un autre domaine qui ne sera pas étudié ici.

Dans les codes CFD ("Computational Fluid Dynamics") les plus répandus, les modèles d'auto-inflammation Diesel ne traitent que la partie correspondant à la cinétique chimique. L'interaction entre la chimie et la turbulence est négligée. Nous allons dans un premier temps décrire les modèles cinétiques appliqués le plus souvent. Plus tard, quelques solutions qui tiennent compte de cette interaction sont proposées. Des tests paramétriques effectués sur le modèle cinétique à quatre étapes de l'IFP [2] sont présentés pour illustrer ce type d'approche.

2.2.1 Modèles cinétiques d'auto-inflammation des hydrocarbures

La réaction chimique globale d'un hydrocarbure est un processus d'une grande complexité, où de nombreuses réactions agissant sur beaucoup d'espèces, ont lieu dans des délais très courts. Ces réactions sont globalement non linéaires. Leur modélisation dans un écoulement turbulent devient donc un aspect critique. Les paramètres suivants, qui sont par la suite décrits en détail, influencent directement le déroulement du mécanisme d'auto-allumage:

- La température est la grandeur fondamentale. Elle indique quelles sont les réactions qui ont lieu en fonction de leurs énergies d'activation caractéristiques.
- Le carburant et l'oxydant doivent être mélangés selon une proportion optimale.
- La combustion n'a pas lieu sans la présence de radicaux. Leurs formation et activité dépendent des réactions élémentaires qui apparaissent, conditionnées par la température.

Cinétique des radicaux - Influence de la température

Initiation

Le processus de création des radicaux débute par une étape appelée "d'initiation" caractérisée par des réactions à très forte énergie d'activation. Pour cela, l'énergie libérée, ainsi que la quantité de radicaux créés est faible. Les réactions typiques d'initiation sont l'arrachement d'un atome d'hydrogène à l'hydrocarbure ou bien son oxydation partielle.

Ramification

Une fois qu'un petit nombre de radicaux a été créé, ils peuvent réagir avec le carburant de manière à se multiplier. L'énergie d'activation des réactions de ramification est plus faible que celle des réactions d'initiation. Le principal mécanisme de production de radicaux est donc la ramification des molécules de carburant à partir de radicaux déjà formés, dont le nombre augmente ainsi rapidement.

Propagation

Les réactions de propagation des radicaux sont les plus exothermiques du système. C'est ici que les produits sont formés. Leurs énergies d'activation sont en général assez faibles. La présence de beaucoup de radicaux implique un fort dégagement d'énergie et en conséquence, une grande augmentation de la température. Une boucle est formée entre l'augmentation du nombre de radicaux et de la température.

Rupture

Il s'agit d'une étape où les réactions possèdent une énergie d'activation nulle, sans dégagement de chaleur. Les radicaux réagissent entre eux, faisant apparaître les produits de la réaction. L'intervention d'une troisième espèce quelconque est nécessaire pour amorcer cette réaction. Les parois solides exercent souvent le rôle de troisième corps, d'où sa capacité à éteindre les flammes.

Concentration de réactifs et leur proportion

Une grande concentration de réactifs facilite naturellement les différentes étapes décrites ci-dessus. Ce n'est cependant pas suffisant pour obtenir des réactions très rapides. Il faut aussi que la proportion entre les réactifs soit proche de la stoechiométrie. En effet, le taux de réaction pendant l'auto-allumage est maximal quand la fraction de mélange, définie par l'équation 2.17, est la plus réactive (Liñan, Mastorakos [3]). La fraction de mélange la plus réactive dépend de la différence initiale de température entre le carburant et l'oxydant et des énergies d'activation des réactions d'auto-allumage [4]. Pour les hydrocarbures utilisés habituellement dans les moteurs à combustion interne, cette valeur n'est pas très éloignée de la valeur stoechiométrique.

Concentration de gaz inertes

La présence de gaz inertes comme l'azote et les produits de la combustion au sein de l'écoulement fait baisser la température globale dans le système. Le temps d'auto-allumage le plus court est donc celui du mélange carburant-oxydant pur, en l'absence d'autres espèces chimiques.

L'écoulement turbulent

Un processus de combustion ne peut avoir lieu que si les réactifs se trouvent mélangés entre eux. Le mélange entre deux espèces est un mécanisme fortement conditionné par la turbulence. Celle-ci fait augmenter de façon significative les transferts de masse et de chaleur au sein de l'écoulement. Les effets de la turbulence sur l'allumage se font sentir du côté de la formation du mélange et aussi du côté des pertes thermiques. Le bilan entre ces deux effets contraires conditionne alors les délais d'auto-inflammation. Une échelle de temps caractéristique de la diffusion des espèces dans l'écoulement turbulent peut être utilisée de manière à prendre en compte les effets turbulents pendant l'auto-allumage. Cette grandeur est la dissipation scalaire χ ,

$$\chi \equiv 2D \frac{\partial Z}{\partial x_k} \frac{\partial Z}{\partial x_k} \quad (2.1)$$

Z est une grandeur appelée fraction de mélange, définie en fonction des concentrations massiques de carburant et d'oxydant présentes dans l'écoulement,

$$Z = \frac{rY_F - Y_O + Y_{O,0}}{rY_{F,0} + Y_{O,0}} \quad (2.2)$$

Cette définition est reprise dans la section 2.3 où la signification et l'interprétation physique de la fraction de mélange sont traitées en détail. La dissipation scalaire permet de déterminer, parmi les points où la fraction de mélange est la plus réactive, quels sont ceux qui s'allument en premier [3]. Un grand taux de dissipation scalaire implique un plus haut niveau de mélange, mais aussi, une augmentation des pertes locales de chaleur. La température locale étant réduite, le délai d'auto-allumage augmente. Les schémas cinétiques d'auto-allumage décrits ensuite ne tiennent pas compte des effets de la turbulence.

2.2.2 Quelques modèles cinétiques existant

La principale difficulté de modélisation des mécanismes cinétiques vient du grand nombre de réactions et d'espèces intervenant. Pour chaque réaction élémentaire, une constante de vitesse doit être calculée, et pour chaque espèce, une équation différentielle de transport doit être résolue. Le traitement des schémas cinétiques complets dans un code industriel n'est donc pas possible ni envisageable. Les modèles couramment utilisés pour décrire l'auto-allumage sont basés sur la réduction des schémas cinétiques de combustion des hydrocarbures. Le modélisateur cherche à diminuer le nombre de réactions et d'espèces intervenant. L'objectif est de conserver des réactions qui peuvent bien représenter les quatre mécanismes de la cinétique des radicaux ou éventuellement, d'utiliser les autres phénomènes importants dans le processus. La simplification maximale, utilisée dans les premières simulations de l'auto-inflammation, est la réduction de tout le schéma réactionnel à une seule équation globale. Cependant, même pour des hydrocarbures simples, cette formulation reste insuffisante. Des schémas réduits à plusieurs étapes élémentaires apparaissent alors pour rendre les modèles plus réalistes.

Le taux de réaction associé à chacune des réactions élémentaires est calculé à l'aide d'une expression d'Arrhenius dont les coefficients sont ajustés selon les conditions d'application. Ce type d'approche est simple et donne en général des délais d'auto-allumage qui ne sont pas très éloignés des valeurs expérimentales obtenues dans des configurations homogènes (en mélange et concentration des espèces) et adiabatiques.

Les termes d'Arrhenius utilisés pour calculer les taux de réaction des différentes étapes, ne font intervenir, en général, que des grandeurs moyennes dans les mailles. Quelques uns de ces modèles sont ensuite décrits.

Le modèle à quatre étapes de l'IFP

Ce modèle, conçu par Zellat et Zeller [2], traite les quatre étapes de la cinétique des radicaux avec une équation chimique simple, représentative de l'ensemble des réactions de chaque type:

I	$F \rightarrow 2 R$	Initiation
II	$F + R \rightarrow 3 R$	Ramification
III	$F + O_2 + R \rightarrow CO_2 + H_2O + R$	Propagation
IV	$2 R + M \rightarrow Inertes + M$	Rupture

F désigne le carburant, R une espèce radicalaire non spécifiée et M désigne une espèce quelconque. Ce schéma est valable pour un ensemble de réactions dont le carburant est un hydrocarbure du type C_nH_m . Les réactions sont les suivantes:

I	$C_nH_m \rightarrow 2 R$	Initiation
II	$C_nH_m + R \rightarrow 3 R$	Ramification
III	$C_nH_m + (n + \frac{m}{4}) O_2 + R \rightarrow n CO_2 + \frac{m}{2} H_2O + R$	Propagation
IV	$2 R + M + (n + \frac{m}{4}) O_2 \rightarrow M + n CO_2 + \frac{m}{2} H_2O$	Rupture

Dans ce schéma, l'espèce radicalaire doit avoir une masse molaire d'environ la moitié de celle du carburant. Elle peut être représentée par un hydrocarbure du type $C_{n/2}H_{m'}$ avec $m' = n/2 + 2$.

Les différentes expressions pour les taux de réaction associées à la consommation d'une espèce i , ainsi que leurs coefficients, peuvent être retrouvés dans [2]. Elles sont du type,

$$\dot{\omega}_i = K_i \prod_{1 \leq j \leq N} \left[\frac{\rho_j}{W_j} \right]^{a_i} \quad (2.3)$$

avec,

$$K_i = A_i T^{b_i} e^{-\frac{T_{a_i}}{T}} \quad (2.4)$$

L'indice i représente chacune des réactions étudiées et l'indice j correspond aux réactifs présents dans chaque étape. Le coefficient A_i est le terme pré-exponentiel, déterminé expérimentalement. Les exposants a_i et b_i donnent l'ordre de la réaction par rapport aux espèces intervenant et T_{a_i} est la température d'activation de la réaction i , donnée par $T_{a_i} = E_i/R$ (E_i est l'énergie d'activation et R est la constante universelle des gaz parfaits).

Le taux de réaction de l'étape de ramification est corrigé par une fonction des masses volumiques du carburant et de l'oxydant $g(\rho_F, \rho_{O_2})$. Etant donnée la complexité de cette réaction, la fonction g est en général réglée par rapport aux délais trouvés expérimentalement. En ce moment, dans KIVA II MB, la fonction g est du type,

$$g = e^{-2\phi} \quad (2.5)$$

où ϕ est la richesse calculée à l'aide des fractions massiques moyennes des réactifs dans les mailles.

Pour une question de rapidité de calcul, ce schéma n'est appliqué qu'aux mailles ayant une température moyenne supérieure à 800 K et une richesse moyenne supérieure à 0.2. La température de transition vers le modèle de combustion à haute température est de 1200 K, valeur justifiée par les divers calculs effectués (section 2.2.3).

Le mécanisme à quatre étapes de Müller, Peters et Liñán

Ce modèle d'auto-allumage [5] résulte de la simplification d'un autre mécanisme déjà réduit à seize étapes par les mêmes auteurs [6]. Au contraire du mécanisme à quatre étapes de l'IFP, le principe n'est pas celui de la simplification directe de la cinétique des radicaux. Il est plutôt basé sur la forme de la courbe de délais d'allumage du n-heptane en fonction de la température (figure 2.1). Cette courbe a été obtenue à partir des calculs effectués avec le schéma cinétique complet du n-heptane qui contient 1011 réactions chimiques élémentaires et 171 espèces chimiques [7]. Elle a ensuite été comparée avec les mesures expérimentales de Ciezki et Adomeit [8].

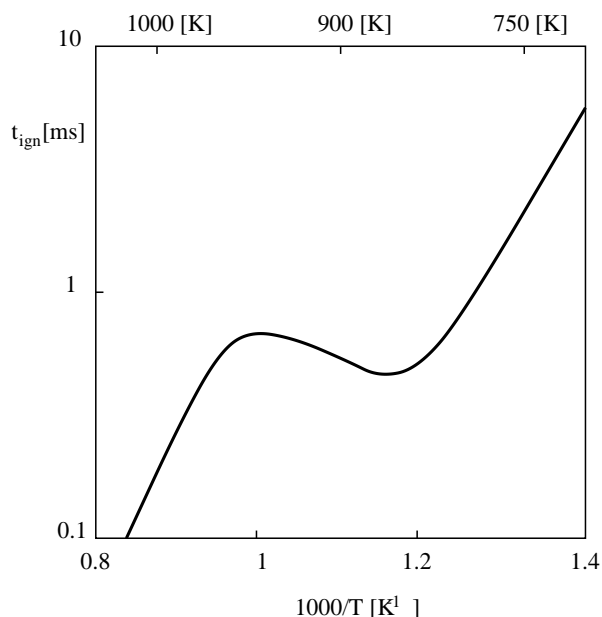
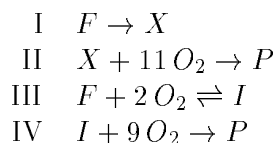


Figure 2.1 : Délai d'allumage d'un mélange homogène n-heptane/air à 40 atm.

Trois zones bien distinctes peuvent être observées sur cette courbe. A basse et à haute température, l'évolution est pratiquement linéaire (en coordonnées d'Arrhenius), tandis qu'entre 850 K et 950 K environ, il y a une inversion de la tendance du délai d'auto-allumage qui décroît avec l'augmentation de la température. Le modèle cherche à reproduire cette tendance à travers l'introduction d'une réaction réversible parmi les quatre réactions élémentaires. Ainsi, les deux premières équations correspondent à la branche à haute température et les deux autres, dont la réaction réversible, à la branche à basse température. L'énergie d'activation de la réaction en sens inverse est suffisamment élevée pour qu'elle ne soit importante qu'à partir d'une température d'environ 850 K. A ce moment, les deux réactions appartenant à la branche basse température perdent leur influence et la transition est effectuée.

Le schéma réduit se compose des quatre réactions suivantes:



I désigne une combinaison d'espèces intermédiaires et P désigne une combinaison de produits de combustion. La disparition progressive de l'espèce I entraîne la diminution de l'importance de la réaction III en sens inverse.

Le modèle arrive à bien reproduire les deux branches inférieure et supérieure mais pas la zone centrale où le temps d'auto-allumage croît avec l'augmentation de la température. Le modèle à seize étapes, dont celui-ci est originaire, est par contre capable de le faire. De toute manière, dans un moteur Diesel, à la fin de la compression de l'air et lors de l'injection du carburant, la température oscille plutôt entre 900 K et 1000 K. L'intérêt pratique de ce type de modèle est donc réduit dans les configurations étudiées.

Le modèle Shell de Halstead, Kirsch et Quin

Le modèle Shell [9] revient au concept de la simulation de la cinétique des radicaux. Il contient huit équations et cinq espèces. Il s'agit d'un modèle conçu d'abord pour l'étude du cliquetis dans les moteurs à allumage commandé mais qui a été adapté à l'auto-inflammation dans les moteurs Diesel.

Ce modèle ne sera pas ici décrit, car ces principes ressemblent à ceux du modèle IFP déjà présenté.

2.2.3 Calculs avec le modèle IFP

Etude globale du modèle: délai en fonction de la température initiale et de la fraction de mélange

Dans un premier temps, des calculs de la variation du délai d'auto-inflammation et de la température maximale à la fin de l'allumage en fonction de la fraction de mélange (définie dans la section 2.3) sont effectués. Un mélange homogène air-carburant (composé d'oxygène et d'azote) évolue dans une chambre adiabatique à vitesse moyenne nulle, évitant ainsi les effets de convection et de diffusion de la masse et de la chaleur. La fraction de mélange est modifiée à chaque calcul. La température initiale dans la chambre est déterminée en fonction des températures initiales du carburant et de l'air et aussi de la valeur de la fraction de mélange imposée.

$$T^0 = T_{air}^0 (1 - Z) + T_F^0 Z \quad (2.6)$$

La richesse envisagée à chaque calcul permet de connaître la composition du mélange à l'aide du système d'équations,

$$\begin{aligned} Y_F &= Y_{air} \frac{\phi}{r_{air}} \\ Y_F + Y_{air} &= 1 \\ Y_{O_2} &= 0.233 Y_{air} \\ Y_{N_2} &= 0.767 Y_{air} \end{aligned} \quad (2.7)$$

où r_{air} est le rapport stoechiométrique du carburant choisi, par rapport à l'air.

La fraction de mélange est calculée en fonction de la concentration initiale de carburant, car pour un mélange non réactif, $Z = Y_F^0$.

Les données physiques du problème sont les suivantes:

- $T_F^0 = 300 K$
- $T_{air}^0 = 1000 K$
- $p = 35 \times 10^6 \text{ barye}^1$
- Carburant choisi: n-heptane (C_7H_{16}) avec $r_{air} = 15.11$ ce qui implique une valeur de la fraction de mélange stoechiométrique $Z_{st} = 0.062$ (équation 2.20)

Les valeurs de la richesse et des concentrations des réactifs correspondant à chaque calcul, ainsi que leurs résultats respectifs concernant la température maximale atteinte et le délai d'auto-allumage, sont présentés dans le tableau 2.1.

Calcul	ϕ	Z	Y_F	Y_{O_2}	Y_{N_2}	$T^0 (K)$	$T_{max} (K)$	$t_{al} (ms)$
1	1.0	0.062	0.062	0.219	0.719	957	3401	0.315
2	0.6	0.038	0.038	0.224	0.738	973	2434	0.276
3	1.5	0.090	0.090	0.212	0.698	937	3161	0.491
4	2.0	0.117	0.117	0.206	0.677	919	2950	0.871
5	0.4	0.026	0.026	0.227	0.747	982	1743	0.301
6	0.35	0.022	0.022	0.228	0.750	984	1465	0.316
7	0.71	0.045	0.045	0.224	0.736	969	2793	0.271
8	0.8	0.050	0.050	0.221	0.729	965	3010	0.286

Tableau 2.1 : Délai d'auto-allumage et température maximale atteinte par un mélange homogène, en fonction de la richesse.

L'évolution de la température en fonction du temps pour chaque calcul est présentée sur la figure 2.2. Il s'agit d'un modèle calé pour que l'allumage ait lieu en premier pour des mélanges pauvres (probablement car le mélange dans un moteur Diesel est globalement pauvre. Nous remarquons aussi que l'intervalle de fraction de mélange dans lequel l'allumage peut avoir lieu est assez limité ($0.022 \leq 0.117$), ce qui correspond en richesse à $0.35 \leq \phi \leq 2.0$. Entre $\phi = 0.35$ et $\phi = 1.0$, nous retrouvons le délai minimal, environ constant dans cet intervalle. Enfin, l'observation attentive des courbes qui traduisent les évolutions à richesse $\phi = 2.0$ et $\phi = 1.5$ ($Z = 0.117$ et $Z = 0.090$ respectivement) permet de constater que lorsque la température maximale est atteinte, une légère chute a lieu avant la stabilisation. Ce phénomène n'est observé que pour des mélanges riches et est dû au fait que, en situation d'excès de carburant, seule l'étape d'initiation, légèrement endothermique, est active à ce moment.

Pour compléter l'étude du comportement du modèle d'auto-allumage en mélange homogène, l'évolution du délai en fonction de la température initiale du mélange a été recherchée. Dans ce cas, les concentrations des réactifs et de l'azote sont restées inchangées durant tous les calculs. La richesse choisie a été de $\phi = 1.0$, correspondant à une fraction de mélange $Z = 0.062$.

¹Toutes les dimensions en unités CGS (KIVA II MB)

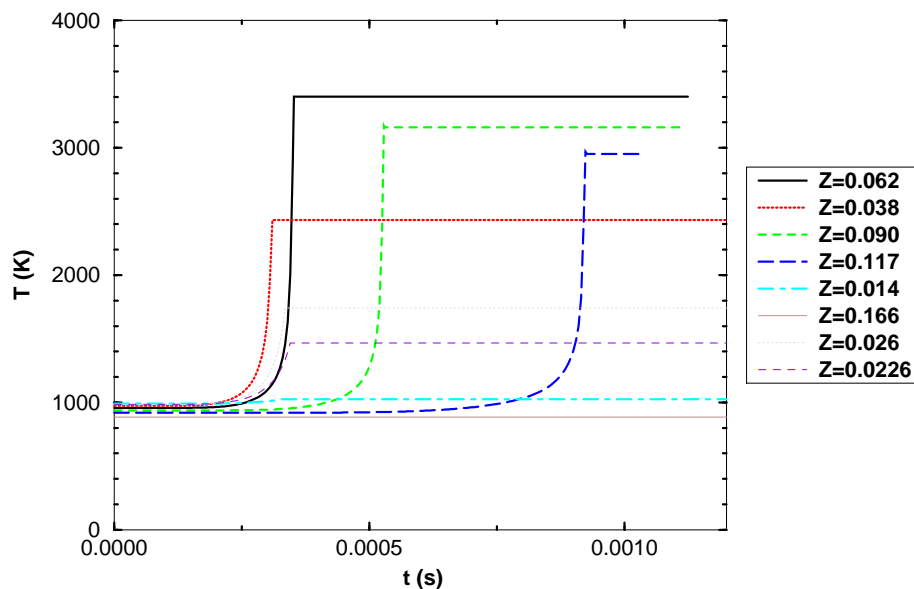


Figure 2.2 : Evolution de la température pendant l'auto-allumage en mélange homogène. Modèle IFP d'auto-inflammation du n-heptane.

Les résultats sont présentés sur la figure 2.3. Nous observons que par rapport aux résultats obtenus par Ciezky et Adomeit [8] avec un mécanisme cinétique complet pour le n-heptane, le modèle à 4 étapes ne reproduit que la tendance globale. En effet, la relation inverse entre le délai d'auto-allumage du n-heptane et de la température n'est pas reproduite. D'ailleurs, le seul apport du modèle à 4 étapes par rapport à une expression d'Arrhenius simple est le changement de pente vérifié entre $T = 800K$ et $T = 850K$. Pour pouvoir reproduire l'augmentation du délai avec l'augmentation de la température, il faut des modèles d'auto-inflammation plus complets, comme nous avons pu le constater auparavant.

Enfin, la variation du délai d'auto-allumage en fonction de la fraction de mélange a été étudiée. Il s'agit d'un complément à la première étude effectuée qui indiquait déjà une tendance du modèle à induire l'auto-allumage dans des endroits où le mélange est pauvre. En effet, la courbe de la figure 2.4 confirme cette tendance. Il est possible de voir aussi de façon nette, que le délai est presque indépendant de la fraction de mélange lorsque celle-ci varie entre $Z = 0.02$ et $Z = 0.06$ (richesse entre $\phi = 0.3$ et $\phi = 1$).

Sensibilité par rapport au pas de temps de calcul

En variant le pas de temps maximal de calcul admis à chaque cycle, les délais d'auto-allumage s'altèrent et suggèrent que des tests de sensibilité par rapport à ce paramètre doivent être effectués.

En changeant le pas de temps maximal admis dans KIVA, qui d'ailleurs devient le pas de temps effectif en dessous de $\Delta t_{max} = 5 \times 10^{-6} s$, des modifications importantes des résultats ont été observées. En effet, l'auto-inflammation est accompagnée de variations très raides des différentes grandeurs calculées, qui ne peuvent pas être suivies si le temps numérique

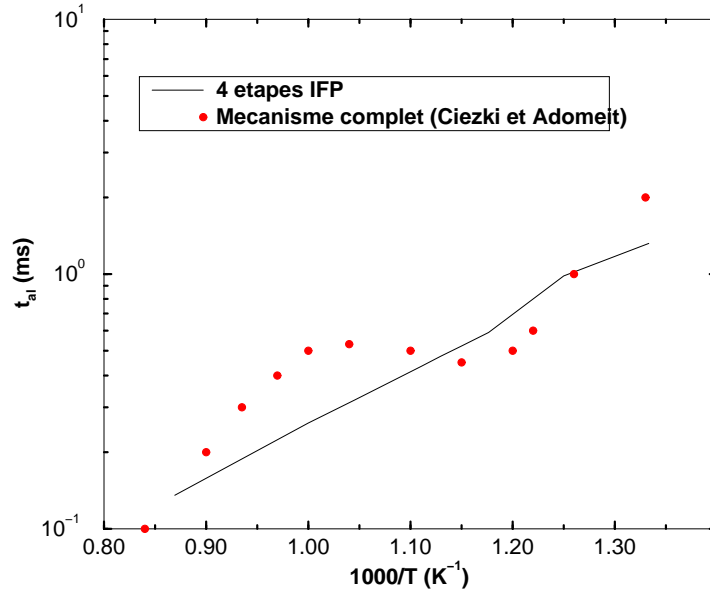


Figure 2.3 : Evolution du délai d'auto-allumage en fonction de la température initiale T^0 du mélange homogène air-carburant (n-heptane) à richesse $\phi = 1$. Comparaison entre les résultats obtenus avec le schéma cinétique complet de Ciezki et Adomeit ($P = 40 \text{ atm}$) et avec le modèle IFP à 4 étapes d'auto-inflammation du n-heptane.

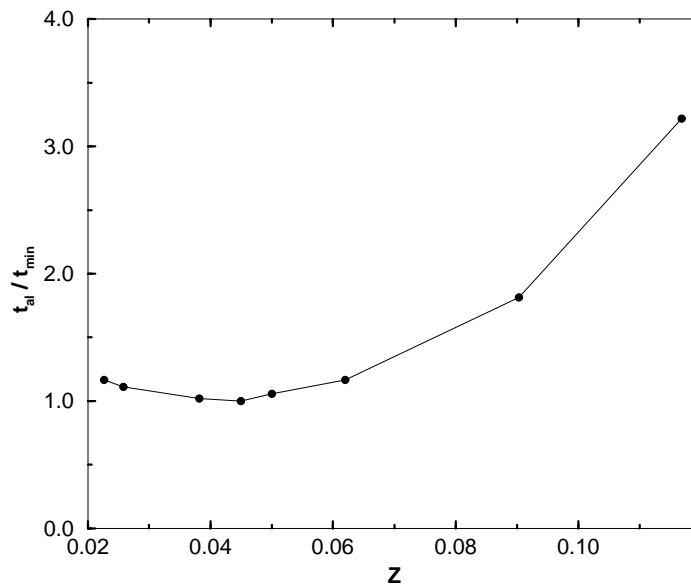


Figure 2.4 : Evolution du délai d'auto-allumage normalisé en fonction de la fraction de mélange. Modèle IFP d'auto-inflammation du n-heptane.

caractéristique est supérieur au temps caractéristique des mécanismes étudiés. Il a fallu donc vérifier si en réduisant le pas de temps, une convergence des résultats serait atteinte. De nouveau, les calculs de test ont été effectués dans une chambre de combustion adiabatique, contenant un mélange homogène air-carburant dans des conditions proches de celles du problème réel à résoudre. Ces conditions sont :

- Richesse unitaire $\phi = 1$
- $T_F^0 = 500 K$
- $T_{air}^0 = 1000 K$
- $p = 35 \times 10^6 \text{ barye}$
- $T^0 = 986.6 K$

Les résultats des calculs de l'évolution de la température dans la chambre en fonction du temps sont représentés sur la figure 2.5. Le pas de temps a été diminué au fur et à mesure jusqu'à l'obtention de la convergence des résultats. La convergence est obtenue pour un pas de temps maximal de $1 \times 10^{-7} s$. Cette valeur est trop petite pour être appliquée dans des calculs à géométries complexes tridimensionnelles. Cependant, l'analyse des résultats pour un pas de temps maximal de $1 \times 10^{-6} s$ montre que les valeurs obtenues dans ce cas s'approchent sans grande erreur des valeurs calculées près de la convergence. Un tel pas de temps, sans doute encore petit, est acceptable dans un calcul moteur.

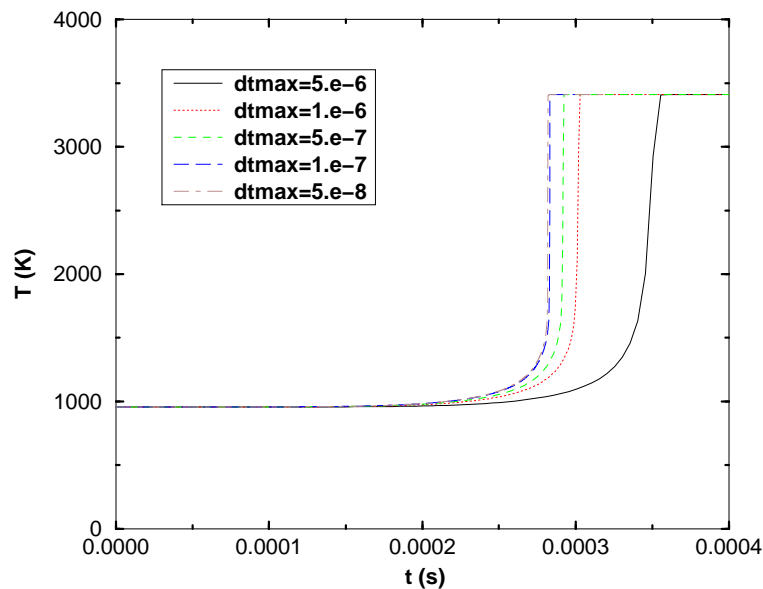


Figure 2.5 : Influence du pas de temps maximal sur l'évolution de la température lors de l'application du modèle d'auto-inflammation IFP à un mélange homogène.

Nous pouvons remarquer que pour un moteur tournant à 4000 tr/min , la différence entre le délai d'auto-allumage obtenu avec des pas de temps maximaux de $5 \times 10^{-8} \text{ s}$ et de $1 \times 10^{-6} \text{ s}$ est de à peine 0.52 degrés de vilebrequin. Cette valeur est faible par rapport à la durée du processus de combustion dans le moteur.

Le même type de calcul a été effectué dans les conditions du problème de référence, c'est à dire, en injectant du carburant gazeux dans la même chambre de combustion remplie d'air. La grandeur repérée dans ce cas a été la quantité globale de chaleur dégagée dans tout le domaine à chaque instant. A l'inverse du problème en mélange homogène, la température moyenne dans le cas présent n'est pas un bon échantillon, car elle varie en chaque point du domaine. L'analyse a été interrompue pour un pas de temps maximal de $1 \times 10^{-7} \text{ s}$ à cause des temps de calcul qui commençaient à devenir trop importants. Les résultats obtenus (figure 2.6) confirment la tendance pour la convergence quand le pas de temps s'approche de $1 \times 10^{-7} \text{ s}$. Si un pas de temps de $1 \times 10^{-6} \text{ s}$ est utilisé, la différence entre les deux calculs pour un moteur tournant à 4000 tr/min serait de 0.65 degrés de vilebrequin. Cette valeur est aussi négligeable que la première par rapport aux temps caractéristiques des événements ayant lieu dans une chambre de combustion.

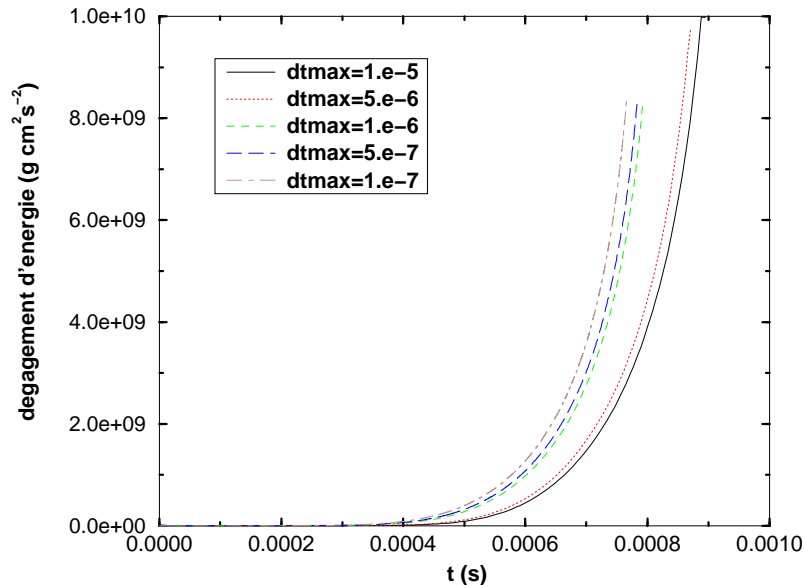


Figure 2.6 : Influence du pas de temps maximal sur l'évolution de la température lors de l'application du modèle d'auto-inflammation à un mélange homogène.

Il a été vu que l'erreur commise en imposant des pas de temps autour de $1 \times 10^{-6} \text{ s}$ aux calculs d'auto-allumage peut être négligée. Avec le modèle à quatre étapes de l'IFP, faut-il trouver un algorithme qui puisse permettre l'utilisation de pas de temps supérieurs en conservant la convergence de la méthode? La réponse dépend des développements envisagés pour l'ensemble des méthodes de combustion. Si le modèle de combustion à haute température est aussi sensible au pas de temps que le modèle d'auto-allumage, alors il paraît intéressant d'étudier ce problème plus en profondeur. Un pas de temps de l'ordre de $1 \times 10^{-6} \text{ s}$ pendant toute la combustion

dans un maillage tridimensionnel mène à des temps totaux de calcul trop élevés. Le problème ne se pose pas si par contre, les petits pas de temps ne doivent être utilisés que pendant l'auto-inflammation. En principe, pendant la combustion à haute température, les gradients temporels des différentes grandeurs qui évoluent au sein de l'écoulement ne doivent pas être trop importants, ce qui résoudrait directement le problème.

2.2.4 Influence de la turbulence sur l'auto-allumage

Influence de la dissipation scalaire et de l'étirement

Jusqu'ici, dans tous les modèles d'auto-allumage étudiés, la turbulence n'a été prise en compte que lors du transport diffusif des espèces réactives qui subissent l'auto-inflammation. Autrement dit, le taux de réaction moyen est calculé à partir des valeurs moyennes des variables de l'écoulement.

Les calculs DNS de Mastorakos *et al.* [3] ont permis l'évaluation des effets turbulents sur les mécanismes d'auto-inflammation. Mastorakos *et al.* ont montré que le rôle de la turbulence est très important dans la formation du mélange réactif. La turbulence peut aussi induire des pertes locales de chaleur dans la zone de réaction selon un taux directement lié à la dissipation scalaire et à ses fluctuations. Ces pertes de chaleur font baisser la température du mélange réactif, en augmentant le délai d'auto-allumage. La dissipation scalaire (équation 2.1) est une mesure du gradient de la fraction de mélange. Elle vient compléter l'information donnée par la valeur de la fraction de mélange la plus réactive, en ce qui concerne la localisation exacte de l'auto-allumage. La fraction de mélange la plus réactive apporte l'information sur la cinétique chimique du système, tandis que la dissipation scalaire contribue pour la partie turbulente (formation du mélange et gradient de la fraction de mélange).

L'étirement (équation 2.48) peut aussi jouer un rôle important dans l'allumage et l'extinction des flammes de diffusion. Thévenin [10] a montré à partir d'expériences de flammes de diffusion laminaires étirées, que des valeurs trop grandes de l'étirement peuvent retarder ou même empêcher la flamme de diffusion de s'allumer. Or, un des principaux effets de écoulement turbulent sur la flamme est précisément l'induction d'un étirement. Cependant, Duclos [11] a vérifié que l'effet de l'étirement induit par le champ turbulent sur la flamme n'est important que si cet étirement a une orientation précise par rapport au front de flamme. L'évaluation de ce paramètre dans une situation réelle est très compliquée et donc, son inclusion dans un modèle devient aussi très difficile.

Le modèle de Mastorakos *et al.*

Mastorakos *et al.* [12] ont étudié ce problème et ont suggéré un modèle basé sur la résolution d'équations de transport pour la température moyenne et pour sa variance. Ces équations ne sont traitées que dans les endroits où la fraction de mélange est la plus réactive. Les différents termes sources font intervenir la dissipation scalaire, ainsi que ses fluctuations.

Le problème est donc fermé de la manière suivante:

1. Calcul de la fraction de mélange moyenne à partir des concentrations des différentes espèces.
2. Calcul de sa variance.

3. Calcul du taux de dissipation scalaire moyen à partir de la variance de la fraction de mélange et d'un temps caractéristique de l'écoulement turbulent.
4. Si la valeur de $\bar{\chi}$ est importante, le modèle turbulent d'auto-allumage est utilisé. La température moyenne et sa variance sont alors calculées dans les endroits où $Z = Z_{mr}$.

D'autres modèles d'auto-allumage faisant intervenir la turbulence

Des modèles d'auto-allumage turbulent en milieu non prémélangé ont été étudiés et testés. Quelques exemples sont ensuite présentés.

Lakshmisha *et al.* [13] ont proposé un modèle d'auto-allumage intégré dans un système double d'équations. Le champ de vitesses moyen et les variables thermodynamiques moyennes sont calculés à l'aide d'un code RANS ("Reynolds Averaged Navier Stokes"). Les variables associées à la réaction chimique (champs scalaires et taux de réaction) sont calculées à partir de l'équation de transport de la *pdf* (fonction densité de probabilité) jointe des variables scalaires (la fraction de mélange et une variable d'avancement de la réaction chimique). Le terme de mélange turbulent dans l'équation de transport de la *pdf* jointe est déterminé à l'aide du modèle de Curl [14]. La chimie est simplifiée à une seule réaction globale (formule d'Arrhenius). Des calculs avec une turbulence homogène permettent, en fonction du nombre de Damköhler, la caractérisation des différents régimes de combustion entre les cas limites de flamme de prémélange en milieu homogène et flamme de diffusion avec chimie infiniment rapide. Ensuite, le problème d'un jet axisymétrique de combustible gazeux, pénétrant dans une atmosphère oxydante à haute température est traité. Le modèle manque de validation expérimentale.

Zhang *et al.* [15] utilisent une approche du type flammelettes laminares (section 2.4) avec des méthodes à *pdf* présumées pour coupler les effets chimiques aux effets turbulents. Au contraire des auteurs précédents, ils utilisent le mécanisme de chimie réduite à quatre étapes de Müller *et al.* [5] qui leur permet de créer une bibliothèque de flammelettes laminares. L'évolution de chaque espèce chimique dans un écoulement réactif laminaire est déterminée en fonction de la fraction de mélange et de l'état d'avancement de la réaction jusqu'à l'équilibre chimique. Une variable d'avancement de la réaction est alors définie. Les taux de consommation des différentes espèces (et le dégagement de chaleur) sont calculés par intégration des taux de réaction associés aux flammelettes laminares, pondérés par les *pdf* associées aux différentes variables de l'écoulement. Des hypothèses sont effectuées concernant l'indépendance statistique de toutes les variables et aussi, sur la forme de certaines *pdf*. De nouveau, les résultats n'ont pas de confirmation expérimentale. Les performances du modèle ne peuvent donc pas être évaluées avec sûreté, même si physiquement les résultats semblent raisonnables.

Dans le chapitre 3, un nouveau modèle d'auto-allumage basé sur une approche de *pdf* présumées est proposé. Les résultats obtenus sont comparés avec des résultats de simulation numérique directe d'allumage d'une couche de mélange entre un oxydant chaud et un carburant froid en milieu turbulent (chapitre 4). Ce modèle est par la suite intégré et testé dans le code KIVA II MB.

2.3 Modèles à scalaire passif pour la flamme établie

Dans la section 2.2, nous avons vu comment modéliser le taux de réaction pendant la phase d'auto-allumage et l'importance que la cinétique chimique peut avoir durant cette période. Cependant, en combustion turbulente, la cinétique chimique peut parfois être négligée par rapport aux propriétés de la turbulence. Si la température est suffisamment élevée, alors la vitesse des réactions chimiques peut être très importante et en conséquence, la manière dont la turbulence intervient sur la flamme devient le paramètre de contrôle du taux de réaction. Ceci est vrai autant pour les flammes turbulentes de prémélange que pour les flammes turbulentes de diffusion.

En combustion turbulente à haute température, seul le calcul des espèces minoritaires, comme quelques polluants réglementés, fait intervenir des schémas cinétiques complexes. Ce thème n'est cependant pas abordé ici. Si l'objectif est la détermination de grandeurs comme le taux de réaction, l'évolution de la pression ou de la température moyenne, les simplifications issues des hypothèses de chimie rapide devant la turbulence peuvent être appliquées.

Entre les flammes de prémélange et les flammes de diffusion, des simplifications différentes ont lieu, menant à des modèles distincts. Au contraire de ce qui se passe dans une flamme de prémélange, où le seul paramètre est l'état d'avancement de la réaction entre les gaz frais et les gaz brûlés, la flamme de diffusion fait intervenir deux paramètres. D'abord il faut résoudre le problème du mélange turbulent entre le carburant et l'oxydant et ensuite celui de l'avancement de la réaction chimique. Dans cette section, nous nous intéressons à la modélisation de flammes de diffusion avec chimie rapide.

Les phénomènes physiques qui ont lieu dans une flamme de diffusion turbulente permettent souvent de simplifier le calcul. L'hypothèse de chimie rapide par rapport à la vitesse de mélange turbulent entre le combustible et l'oxydant permet de considérer qu'à chaque instant des grandeurs comme la concentration des espèces et la température ne dépendent que de l'évolution de scalaires passifs ou conservés [16].

En combustion, une grandeur est conservée quand elle ne subit aucune altération (production ou disparition) en traversant la flamme [17]. En conséquence, le calcul est réduit à une équation différentielle homogène (sans termes source), de résolution plus simple, l'équation de transport du scalaire passif. Le fait de ne pas avoir besoin de modéliser des termes sources associés aux réactions chimiques élimine l'un des problèmes majeurs concernant l'étude numérique de la combustion: le traitement de l'interaction entre les réactions chimiques de combustion et la turbulence. Les problèmes du mélange turbulent et de la chimie peuvent alors être découplés et résolus indépendamment l'un de l'autre.

L'approche par les scalaires conservés permet donc de résoudre des problèmes de combustion turbulente non prémélangée d'une manière simplifiée. Ceci résulte des facteurs suivants:

- L'homogénéisation des équations de transport des espèces et de la température à travers l'annulation de la modélisation des taux de réaction.
- L'établissement de relations entre les concentrations, les grandeurs thermochimiques et la valeur du scalaire conservé indépendantes de la turbulence.

- Le problème de la combustion turbulente est transformé en un problème de transport turbulent non réactif des scalaires passifs. La réaction chimique est traitée indépendamment du transport turbulent.

2.3.1 Etablissement des équations de transport du scalaire conservé

L'équation de transport d'un scalaire conservé peut être déduite des équations de transport des espèces intervenant dans la réaction chimique. Les hypothèses suivantes permettent l'élimination de certains termes d'ordre inférieur pendant la combustion dans les équations de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces [18]:

- Les effets radiatifs sont négligeables.
- Les effets de Soret et Dufour sont négligeables, c'est à dire, le transport des espèces par les gradients de température et son réciproque (transport d'énergie par les gradients de concentration) est beaucoup plus petit que le transport diffusif des différentes grandeurs.
- Les diffusivités binaires sont identiques pour toutes les espèces; cette hypothèse permet l'écriture de la loi de Fick.
- Les forces massiques sont négligeables.

En plus, il est supposé que les écoulements de carburant et d'oxydant sont en phase gazeuse.

Toutes ces hypothèses n'empêchent cependant pas qu'une large gamme de problèmes de combustion turbulente non prémélangée puissent encore être résolus à travers la méthode des scalaires conservés.

L'équation de transport d'une espèce j s'écrit,

$$\frac{\partial \rho Y_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Y_j}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial Y_j}{\partial x_k} \right) + \dot{\omega}_j \quad (2.8)$$

Si chaque terme est multiplié par le rapport entre la masse de l'élément i dans l'espèce j et la masse de l'espèce j (μ_{ij}), alors le scalaire passif correspondant à l'espèce i (Z_i) est défini comme,

$$Z_i \equiv \sum_{1 \leq j \leq N} \mu_{ij} Y_j, \quad i = 1, 2, \dots, L \quad (2.9)$$

où N est le nombre d'espèces et L le nombre d'éléments. Si pour chaque élément i , les N équations qui correspondent aux N espèces sont additionnées, un système à $L - 1$ équations indépendantes est obtenu;

$$\frac{\partial \rho Z_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Z_i}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D_i \frac{\partial Z_i}{\partial x_k} \right) \quad (2.10)$$

avec,

$$\sum_{1 \leq i \leq L} Z_i = 1 \quad (2.11)$$

qui complète le système. D_i est le coefficient de diffusion laminaire associé à l'élément chimique i .

Un système à L équations pour les L scalaires passifs Z_i est alors défini. Dans ce cas, les scalaires calculés sont les fractions massiques des différents éléments chimiques. D'autres grandeurs peuvent être utilisées comme scalaires passifs. La prochaine section leur sera dédiée.

Il faut noter que le terme source a disparu car pendant la réaction de combustion, il n'y a pas de création ni de destruction d'éléments chimiques, c'est à dire,

$$\sum_{1 \leq j \leq N} \dot{\omega}_j = 0 \quad (2.12)$$

En introduisant des hypothèses additionnelles [18], (faible nombre de Mach, nombre de Lewis unitaire: $\lambda/C_p = \rho D$, et $\partial p/\partial t$ négligeable) une équation pour un scalaire passif associé à l'enthalpie (ou à la température) peut être écrite,

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Z}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial Z}{\partial x_k} \right) \quad (2.13)$$

2.3.2 Autres scalaires conservés

Le choix possible du scalaire conservé à utiliser dans les problèmes de combustion non prémélangée est assez large. En général, ces variables sont linéairement dépendantes les unes des autres et donc une solution obtenue entraîne la solution des autres. Il y a cependant des circonstances où cette dépendance n'existe pas (par exemple, lorsque les diffusivités binaires des différents réactifs ne sont pas identiques). Dans ce cas, le taux de réaction du scalaire conservé est toujours nul, mais il y a des termes sources qui apparaissent dans son équation de transport qui proviennent des effets de diffusivités différentes. Il faut donc dans ces cas, savoir choisir les bonnes variables qui correspondent au problème posé.

Heureusement, ce problème n'existe pas pour des nombres de Reynolds suffisamment élevés. En effet, la diffusion est un phénomène de nature moléculaire: Quand l'écoulement est suffisamment turbulent, la diffusion turbulente est beaucoup plus importante et efficace que la diffusion moléculaire. Les différences des coefficients de diffusion entre les espèces sont alors réduites et cette approche devient valable. Les coefficients D_i associés à chaque espèce sont alors ramenés à un coefficient global et unique de diffusion moléculaire, D . Lors de la modélisation de la combustion turbulente non prémélangée à travers la méthode des scalaires passifs, l'hypothèse de chimie rapide est en général la plus restrictive. La prise en compte de diffusivités binaires identiques pour les différentes espèces n'entraîne pas de grandes erreurs.

Quelques uns des scalaires conservés les plus utilisés sont ensuite identifiés:

Variables de Shvab-Zeldovich

Si la réaction chimique globale entre le carburant et l'oxydant est décrite par une seule réaction à un seul pas (chimie simple),

$$F + r.O \rightleftharpoons (r + 1)P^2 \quad (2.14)$$

alors les taux de réaction pour chaque espèce respectent les relations suivantes [17],

$$\dot{\omega}_F = \frac{1}{r}\dot{\omega}_O = -\frac{1}{r+1}\dot{\omega}_P \quad (2.15)$$

Il peut être démontré que les paramètres de couplage de Shvab-Zeldovich β_i , respectent les équations de transport des scalaires conservés du type 2.10 [17]. Les variables β_{FO} , β_{FP} et β_{OP} sont donc des scalaires conservés;

$$\begin{aligned} \beta_{FO} &\equiv Y_F - \frac{Y_O}{r} \\ \beta_{FP} &\equiv Y_F + \frac{Y_P}{r+1} \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\beta_{OP} \equiv Y_O + \frac{rY_P}{r+1}$$

Les relations 2.15 impliquent que les variables de Shvab-Zeldovich n'ont d'application pratique que lorsque la réaction chimique s'effectue en un seul pas.

La fraction de mélange

Plusieurs facteurs contribuent à ce que la fraction de mélange soit l'un des scalaires conservés le plus utilisé dans des calculs de combustion non prémélangée. Si le système étudié est composé de deux réactifs initialement séparés, et qu'ensuite leur rencontre entraîne une réaction chimique de combustion, alors la fraction massique de chaque élément peut être normalisée sous la forme $(Z_i - Z_{i2}) / (Z_{i1} - Z_{i2})$. Il s'agit donc d'un scalaire passif conçu à partir d'autres scalaires passifs solutions de l'équation 2.10 et qui vaut 0 du côté du réactif 2 et 1 du côté du réactif 1. Bilger [19] a démontré que les variables scalaires normalisées de cette façon sont toutes identiques. Il a aussi démontré que tous les scalaires conservés ont des relations linéaires entre eux. La variable fraction de mélange peut alors être définie comme,

$$Z \equiv \frac{Z_i - Z_{i2}}{Z_{i1} - Z_{i2}} = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2} \quad (2.17)$$

Les indices 1 et 2 correspondent respectivement aux écoulements des réactifs 1 et 2. Les variables β sont des variables de Shvab-Zeldovich telles qu'elles ont été définies dans les équations 2.16.

Les avantages de l'utilisation de la fraction de mélange pour résoudre le problème de la combustion viennent de sa propre formulation (équation 2.17) et des propriétés décrites précédemment:

²Equation écrite en masse: 1 kg de carburant qui réagit avec r kg d'oxydant, formant (1+r) kg de produits

- Les conditions aux limites qui correspondent à chaque élément i sont transformées en conditions globales, semblables pour chacun des éléments,

$$\begin{aligned}
 \text{source 1 :} & \quad Z = 1, & t > 0 \\
 \text{source 2 :} & \quad Z = 0, & t > 0 \\
 \text{parois solides :} & \quad \partial Z / \partial n = 0, & t > 0
 \end{aligned}
 \tag{2.18}$$

- La fraction de mélange est un traceur de l'espèce réactive 1, car la combustion n'intervient pas sur sa formation ou destruction. Du fait que $Z = 1$ dans l'écoulement 1 et $Z = 0$ dans l'écoulement 2, la fraction de mélange est égale à la fraction massique de 1 dans un écoulement inerte (non réactif) et à la fraction massique de fluide provenant de la source 1 dans un écoulement réactif.
- Si l'espèce 1 est le carburant F et l'espèce 2 est l'oxydant O , la fraction de mélange peut être évaluée algébriquement,

$$Z = \frac{rY_F - Y_O + Y_{O,0}}{rY_{F,0} + Y_{O,0}}
 \tag{2.19}$$

$Y_{F,0}$ et $Y_{O,0}$ sont les compositions de F et de O suffisamment loin de la flamme.

Position de la flamme

La position de la flamme au cours du temps est un paramètre important en combustion. Dans un système isotherme où les réactifs ne sont pas prémélangés à leur état initial, la flamme va se placer à chaque instant à l'endroit où leur proportion est stoechiométrique. La valeur stoechiométrique de la fraction de mélange Z_{st} indique donc la position de la flamme. Sachant qu'à la stoechiométrie, $rY_F = Y_O$, alors,

$$Z_{st} = \frac{Y_{O,0}}{rY_{F,0} + Y_{O,0}}
 \tag{2.20}$$

Une fois le champ de fraction de mélange connu, la position instantanée de la flamme est donc bien déterminée (voir un exemple de calcul de la position de la flamme dans l'annexe A). Si les réactions chimiques sont réversibles ou si la chimie n'est pas suffisamment rapide par rapport au mélange turbulent, alors la zone de réaction est élargie à cause des réactions de dissociation. Dans ce cas, Z_{st} indique la position instantanée du centre de la zone de réaction.

2.3.3 Détermination des concentrations et des grandeurs thermodynamiques en fonction de la fraction de mélange

Le problème du transport de la fraction de mélange³ a été résolu dans la section antérieure. Il faut maintenant chercher à introduire l'influence de la chimie.

³Il a été choisi de présenter ce problème en fonction de la fraction de mélange. Cependant, les évaluations qualitatives effectuées sont valables pour n'importe quel scalaire passif.

La relation entre la fraction de mélange et les grandeurs thermochimiques étudiées dépend du degré de simplification souhaité pour le traitement des processus chimiques. Le cas le plus simple est de considérer que la réaction chimique est infiniment rapide et qu'elle se déroule en une seule étape (équation 2.14). La flamme peut donc être considérée comme une surface d'épaisseur infinitésimale, divisant l'écoulement en deux parties distinctes, la partie oxydant, où il n'y a pas de carburant et la partie carburant, où l'oxydant ne peut pas exister (flamme de Burke-Schumann [18]). Dans ce cas, des relations linéaires entre Z et les concentrations des réactifs peuvent être établies. Sachant que pour $Z = Z_{st}$, le carburant et l'oxydant sont complètement consommés, des expressions pour les concentrations de réactifs, de produits et de la température peuvent être déduites à partir de la figure 2.7 où, par simplicité, il a été considéré que $Y_{F,0} = Y_{O,0} = 1$. Le coefficient stoechiométrique r est celui de l'équation 2.14.

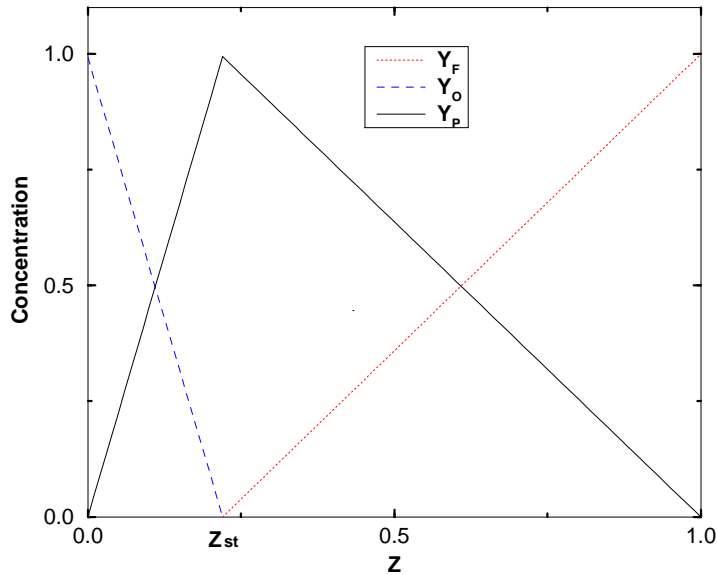


Figure 2.7 : Composition du mélange en fonction de la fraction de mélange Z ; chimie simple et infiniment rapide. $Y_{F,0} = Y_{O,0} = 1$

$$Z \leq Z_{st} : \begin{cases} Y_F = 0 \\ Y_O = Y_{O,0} \frac{Z_{st} - Z}{Z_{st}} \\ Y_P = Z Y_{F,0} (r + 1) \\ T = T_{O,0} + \frac{Z}{Z_{st}} (T_{ad} - T_{O,0}) \end{cases} \quad (2.21)$$

$$Z \geq Z_{st} : \begin{cases} Y_F = Y_{F,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} \\ Y_O = 0 \\ Y_P = Z Y_{F,0} (r + 1) \frac{1 - Z}{1 - Z_{st}} \\ T = T_{F,0} + \frac{Z - 1}{Z_{st} - 1} (T_{ad} - T_{F,0}) \end{cases} \quad (2.22)$$

T_{ad} est la température adiabatique de flamme de diffusion. La valeur de Z définit donc à chaque instant et à chaque point de l'écoulement les concentrations des réactifs, ainsi que leur température si un scalaire conservé peut être associé à cette grandeur.

Si la réaction est réversible ou si la chimie n'est pas infiniment rapide, il y aura du carburant et de l'oxydant dans la zone près de la valeur stoechiométrique z_{st} . Cependant, l'hypothèse d'équilibre chimique (ou de chimie rapide) implique que le taux de réaction est toujours beaucoup plus grand que le taux de mélange turbulent. La composition du mélange est donc aussi dans ce cas, fonction unique de la fraction de mélange. La solution du problème passe par la détermination de deux variables indépendantes. La première est en général le scalaire conservé. La deuxième peut être par exemple une espèce moléculaire dont le taux de réaction doit être modélisé ou une perturbation de la solution de chimie rapide [16]. Liñan [20] et Cuenot [21] proposent une solution asymptotique (pour de grandes énergies d'activation) du problème. Dans ce cas, la dépendance des concentrations et de la température est déterminée en fonction de la fraction de mélange et d'un nombre de Damköhler caractéristique du système (section 3.3.3).

Une autre solution possible pour la résolution de problèmes avec équilibre chimique mais où la chimie n'est pas infiniment rapide par rapport à la turbulence, est l'utilisation du concept de flammelettes [22, 23, 24, 25, 26]. La section 2.4 traite ce genre d'approche.

Dans tous les cas antérieurs, les résultats peuvent être représentés par des relations du type,

$$Y_j = Y_j(Z) \quad (2.23)$$

Si un scalaire conservé peut être défini pour la température (équation 2.13), alors les relations suivantes sont aussi valables,

$$T = T(Z) \quad (2.24)$$

$$\rho = \rho(Z) \quad (2.25)$$

A chaque instant et en chaque point de l'écoulement, les équations 2.24 et 2.25 sont toujours vérifiées.

Dans cette section, le concept de scalaire passif a été présenté et son équation de transport établie (équation 2.10). Une fois résolue, celle-ci permet d'obtenir l'évolution instantanée de ce scalaire. La manière d'obtenir les relations entre les scalaires passifs et les grandeurs thermo-chimiques a été décrite. Cependant, pour résoudre complètement le problème, ces grandeurs doivent être calculées en fonction des coordonnées spatiale et temporelle. Comme les problèmes à résoudre sont de nature turbulente, ce sont leurs valeurs moyennes ainsi que leurs moments statistiques d'ordre supérieur qui doivent être calculés. Ceci est possible à travers l'introduction de la notion de fonction densité de probabilité (*pdf*) associée au scalaire passif.

2.3.4 Etude probabiliste des flammes de diffusion

L'évolution instantanée des grandeurs thermo-chimiques en fonction du scalaire passif Z et la fonction densité de probabilité qui lui est associée permettent la détermination des valeurs moyennes et des moments statistiques d'ordre supérieur associés à ces grandeurs.

$$\overline{Y(Z)^n} = \int_{-\infty}^{+\infty} Y(Z)^n P(Z) dZ \quad (2.26)$$

Cette équation permet le calcul des moments statistiques d'ordre n autour de la valeur zéro de la fonction $Y(Z)$.

- $n = 1$ correspond à la moyenne.
- $n = 2$ correspond à la variance autour de zéro de $Y(Z)$.

La connaissance de la *pdf* associée au scalaire passif, évaluée en chaque point et à chaque instant, est donc nécessaire à la fermeture du problème de la combustion. Le problème qui se pose maintenant est la détermination des fonctions densité de probabilité.

Les *pdf* dépendent de la forme de l'écoulement et du dégagement de chaleur associé à la combustion. Etant donnée la diversité des problèmes à résoudre et sachant qu'une fonction de probabilité différente doit être définie à chaque instant et en chaque point du domaine du problème, il est clair que le calcul des *pdf* n'est pas un travail aisé. Dans le cas où il est impossible de la déterminer pour un problème spécifique, la résolution à travers la méthode des scalaires passifs est naturellement compromise.

Pour déterminer une *pdf*, trois méthodes peuvent être utilisées. Soit la *pdf* est calculée expérimentalement, soit elle est présumée à partir de distributions de probabilité connues, soit une équation de transport associée à la *pdf* jointe des différentes grandeurs de l'écoulement est écrite et résolue.

Détermination expérimentale des *pdf*

Des *pdf* ont été mesurées pour la fraction de mélange, pour la température et pour d'autres grandeurs thermo-chimiques dans différentes conditions expérimentales et pour différents écoulements [16]. Une attention spéciale a été portée aux écoulements non réactifs car les configurations sont plus simples et les mesures expérimentales plus faciles à effectuer. Pour ce qui est des écoulements réactifs, jusqu'à aujourd'hui, peu de travaux expérimentaux ont été réalisés. Ils s'intéressent plutôt à des géométries simples et d'usage typique en problèmes de combustion turbulente. Bilger [16] a fait des mesures de *pdf* dans des couches de mélanges réactifs, dans des réacteurs et dans des configurations de jets de combustible qui pénètrent dans une atmosphère oxydante. Kennedy et Kent [27] ont aussi obtenu des mesures de *pdf* sur des flammes de diffusion turbulentes créées par des jets de combustible. Le coût et la difficulté de réalisation de ce type d'expériences ralentissent le développement de cette voie comme moyen de détermination des *pdf*.

La simulation numérique directe (DNS) peut être vue comme une autre manière de déterminer expérimentalement les *pdf*, en résolvant les équations de Navier-Stokes sans utilisation de modèles de turbulence. Toutes les échelles turbulentes sont donc calculées de façon exacte. Ce niveau de précision est utile à l'établissement des *pdf* des différentes grandeurs intervenant. En DNS, les propriétés et les caractéristiques de l'écoulement peuvent être complètement changées, sans avoir à résoudre les difficultés liées aux changements de la géométrie. Les simulations sont alors orientées en fonction du type de *pdf* envisagé.

Si le but du calcul est par exemple la détermination d'une *pdf* pour une variable a générique d'un écoulement quelconque, toutes les valeurs de a calculées à un instant donné sont ordonnées, en regardant la fréquence avec laquelle chaque valeur tombe dans un intervalle prédéfini. Une *pdf* spatiale pour cet instant est alors déterminée. Des *pdf* temporelles peuvent aussi être calculées à chaque point du domaine. Pour cela, les valeurs de a à une certaine position de l'espace sont fixées pendant un certain intervalle de temps qui dépend de la précision envisagée. Il faut naturellement que l'écoulement soit stationnaire.

Notons que mesurer des *pdf* dans une expérience ou dans une DNS est cependant très éloigné des besoins des modèles. Dans ce cas, il faut identifier les paramètres qui contrôlent la *pdf* et ensuite proposer des relations entre ces paramètres et la *pdf*, comme décrit ci-dessous.

Calcul des *pdf* par les moments statistiques d'un scalaire passif: *pdf* présumées

Parfois, les mesures expérimentales (ou en DNS) des *pdf* montrent que la distribution des variables aléatoires suit des lois mathématiques connues. Si les paramètres qui définissent ces lois sont calculables ou mesurables à partir des données globales de l'écoulement (données cinématiques ou thermodynamiques), alors ces *pdf* peuvent être présumées partout dans l'écoulement. Cette méthode est donc fondée sur le choix de fonctions densité de probabilité connues, dont les paramètres sont calculés en fonction des moments statistiques des grandeurs comme par exemple, les scalaires conservés. Le calcul de leurs moments est effectué soit à l'aide de formules algébriques simples (fonctions des moments d'ordre inférieur), soit à l'aide de leurs équations de transport à travers le champ turbulent.

L'équation pour le transport de la valeur moyenne de la fraction de mélange (évaluée au sens de Favre) est,

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho}\tilde{Z}) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left[\bar{\rho}D \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_k} - \bar{\rho}\tilde{u}_k''\tilde{Z}'' \right] \quad (2.27)$$

Cette équation est obtenue de façon classique, en écrivant chaque variable comme la somme de sa valeur moyenne plus une fluctuation et ensuite, moyenner l'équation 2.10. Le dernier terme du côté droit est une corrélation entre les fluctuations de vitesse et de fraction de mélange. Son origine est définie au mieux pour traiter la turbulence. Comme pour les équations de transport de la quantité de mouvement et de l'énergie, il faut le modéliser en fonction de grandeurs connues. Une hypothèse classique du type gradient, valable pour des nombres de Reynolds suffisamment élevés est utilisée,

$$-\bar{\rho}\tilde{u}_k''\tilde{Z}'' = \bar{\rho}D_t \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_k} \quad (2.28)$$

La variance de la fraction de mélange ($\widetilde{Z''^2}$) peut sur certaines hypothèses être évaluée à partir de la valeur moyenne \tilde{Z} . C'est le cas des modèles du type EBU qui supposent que la chimie est infiniment rapide devant la turbulence (*cf.* section 2.4). Cependant, ces hypothèses ne sont pas valables pendant l'auto-inflammation où le temps chimique caractéristique n'est pas suffisamment petit par rapport aux échelles de turbulence. Une équation de transport de la variance de la fraction de mélange doit être résolue,

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho} \widetilde{Z''^2} + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \widetilde{u_k Z''^2} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial x_k} \right) - 2 \bar{\rho} \widetilde{u_k'' Z''} \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{\rho} \widetilde{u_k'' Z''^2} - 2 \bar{\rho} D \frac{\partial \widetilde{Z''}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{Z''}}{\partial x_k} \quad (2.29)$$

Les trois corrélations qui apparaissent du côté droit de l'équation doivent être aussi modélisées. $-\bar{\rho} \widetilde{u_k'' Z''}$ et $-\bar{\rho} \widetilde{u_k'' Z''^2}$ sont à nouveau traitées par des modèles du type gradient (équation 2.28),

$$-\bar{\rho} \widetilde{u_k'' Z''} = \bar{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{Z}}{\partial x_k} \quad (2.30)$$

$$-\bar{\rho} \widetilde{u_k'' Z''^2} = \bar{\rho} D_t \frac{\partial \widetilde{Z''^2}}{\partial x_k} \quad (2.31)$$

Le dernier terme de droite traduit le taux de dissipation scalaire moyen $\tilde{\chi}$, grandeur très importante à cause de sa signification physique. Le taux de dissipation scalaire peut être interprété comme l'inverse d'un temps caractéristique de diffusion. Ce terme est souvent modélisé à partir de de l'étirement turbulent ϵ/k [22],

$$\tilde{\chi} = 2 D \frac{\partial \widetilde{Z''}}{\partial x_k} \frac{\partial \widetilde{Z''}}{\partial x_k} = C_D \frac{\epsilon}{k} \widetilde{Z''^2} \quad (2.32)$$

étant C_D une constante du modèle.

Des moments statistiques d'ordre supérieur à deux peuvent être calculés de la même façon en établissant leurs équations de transport respectives. Cependant, le calcul s'alourdit au fur et à mesure que l'on avance dans le nombre de paramètres à déterminer. Evidemment, en augmentant le nombre de paramètres calculés, les *pdf* ainsi obtenues gagnent en généralité.

Quelques distributions utilisées habituellement dans les calculs de combustion sont par exemple:

- Des Gaussiennes tronquées à deux ou à quatre paramètres,

$$P(Z) = \alpha \delta(Z) + \beta \delta(1-Z) + \gamma e^{-(Z-\mu)^2/(2\sigma^2)} \quad (2.33)$$

où α , β , σ et μ sont des constantes positives ou nulles à déterminer à partir des différents moments statistiques de Z . γ est une constante qui vaut zéro hors de l'intervalle $0 < Z < 1$, pouvant autrement s'exprimer en fonction des quatre premiers paramètres [18]. $\delta(Z)$ et $\delta(1-Z)$ représentent des fonctions de Dirac centrées sur les points $Z = 0$ et $Z = 1$ respectivement.

- Des fonction β ,

$$P(Z) = \begin{cases} 0 & \text{si } Z < 0 \quad \text{ou} \quad Z > 1 \\ \frac{\Gamma(a+b)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} Z^{a-1} (1-Z)^{b-1} & \text{autrement} \end{cases} \quad (2.34)$$

La distribution β n'a besoin que de deux paramètres, a et b qui sont déterminés en fonction de la valeur moyenne de Z et de sa variance. $\Gamma(a)$ est la fonction Γ (factorielle généralisée).

$$a = \frac{\tilde{Z}}{\widetilde{Z''^2}} \left(\tilde{Z} - \tilde{Z}^2 - \widetilde{Z''^2} \right) \quad (2.35)$$

$$b = \frac{\tilde{Z} - 2\tilde{Z}^2 + \tilde{Z}^3 - \widetilde{Z''^2} + \tilde{Z}\widetilde{Z''^2}}{\widetilde{Z''^2}} \quad (2.36)$$

Détermination des *pdf* à travers leurs équations de transport

Avec l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs actuels, un autre moyen de déterminer les *pdf* est envisageable. Il s'agit de la résolution des équations de transport des *pdf* jointes de toutes les variables de l'écoulement dans le champ turbulent.

Pope [28] a étudié les bases de la résolution d'un problème de combustion à l'aide de cette méthode. Il s'agit d'un problème mathématique et physique assez lourd que Vervisch [29] et Haworth et Pope [30, 31] ont aussi traité. L'idée est de déterminer la *pdf* associée à la vitesse et à la composition en chaque point et à chaque instant de l'écoulement réactif turbulent à l'aide de son équation de transport. Cette approche permet de résoudre le problème sans avoir besoin de modéliser les corrélations d'ordre supérieur qui résultent de l'utilisation des moyennes de Reynolds ou de Favre. Les effets de la convection, des réactions chimiques, des forces massiques et du gradient de la pression moyenne sont obtenus directement sans approximations. Il ne reste qu'à modéliser les termes de diffusion moléculaire (qui font intervenir la dissipation scalaire) et du gradient de pression fluctuante. Le prix à payer est le formalisme lourd de l'écriture des équations et le temps de calcul nécessaire pour les résoudre.

2.4 Modélisation à l'aide de flammelettes laminaires

Nous avons vu dans la section précédente que la dépendance entre un scalaire passif et les variables thermodynamiques de l'écoulement n'est pas simple à déterminer lorsque la chimie ne peut pas être considérée comme infiniment rapide devant la turbulence. Le concept de flammelettes est donc appliqué quand l'équilibre chimique existe sur la flamme, mais celle-ci n'est pas une interface infiniment mince entre gaz brûlés et gaz frais ou entre carburant et oxydant. La combustion a quand même lieu dans des couches de faible épaisseur, présentes au sein de l'écoulement turbulent, qui sont convectées et étirées par celui-ci [22, 26, 18]. La structure interne des flammelettes est unidimensionnelle et dépend du temps. Dans certaines conditions d'écoulement et de réactions chimiques, ces couches conservent la structure interne des flammelettes laminaires. L'attribut "laminaire" vient du fait que les flammelettes ont des dimensions suffisamment faibles, par rapport aux échelles turbulentes les plus petites, pour que l'on puisse considérer que leur temps caractéristique est négligeable devant celui des fluctuations turbulentes (figure 2.8). Aucune structure turbulente n'est assez petite pour pénétrer le front et agir sur la structure interne de la flamme.

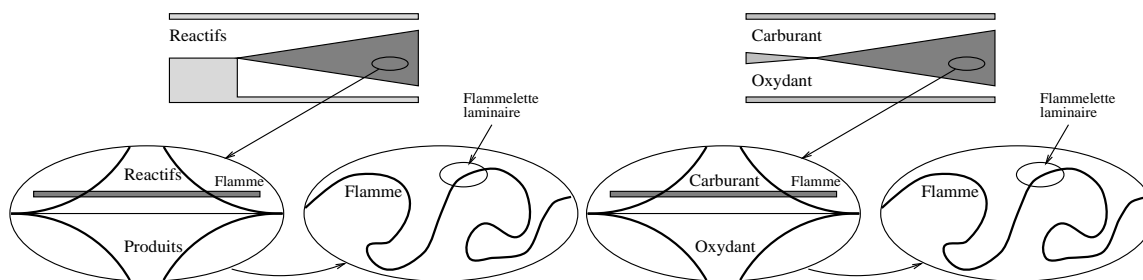


Figure 2.8 : Description de la combustion turbulente prémélangée et non prémélangée à l'aide d'une structure de flammelettes.

La popularité des modèles basés sur le concept de flammelettes vient du fait que, la plupart des applications pratiques de combustion d'intérêt en ingénierie tombe dans ce régime. Ceci est le cas des moteurs alternatifs à piston ou des moteurs d'avion.

Dans un moteur Diesel, le carburant est consommé à la fois par une flamme de prémélange et par une flamme de diffusion [1]. Chaque régime possède ses propres caractéristiques qui impliquent différentes approximations pour leur modélisation. Nous allons voir dans cette section les caractéristiques des modèles de flammelettes dans chacun de ces régimes extrêmes.

2.4.1 Flammelettes en combustion prémélangée

En combustion prémélangée, les flammelettes se propagent dans la direction normale à leur plan vers le mélange des gaz frais [23]. Leur emplacement dépend surtout de la topologie de l'écoulement. Poinsot *et al.* [32] proposent que pour qu'un régime de flammelettes soit établi, les gaz frais doivent être séparés partout des gaz brûlés par la zone de réaction active dont l'épaisseur est relativement mince. L'évaluation des paramètres qui contrôlent l'extinction de la flamme en fonction des grandeurs caractéristiques de l'écoulement turbulent devient ainsi fondamentale à la détermination des différents régimes de combustion prémélangée. La plupart des modèles de ce genre imposent à la flammelette un comportement identique à celui d'une flamme laminaire subissant un étirement équivalent à celui de la flamme turbulente étudiée.

Cette condition est plus restrictive que celle établie par Poinso *et al.* [32] et ne s'avère pas forcément nécessaire.

Considérons une flamme de prémélange qui se propage dans un écoulement turbulent. Cet écoulement est caractérisé par une vitesse turbulente u' et par une longueur intégrale turbulente l_t . Une flamme de prémélange est caractérisée par une vitesse de flamme laminaire S_l et une épaisseur de flamme laminaire l_f . Plusieurs auteurs [23, 32, 33] ont cherché à illustrer les différents régimes de combustion en fonction de quelques paramètres adimensionnels, construits à partir des variables mentionnées, représentant la physique du processus. Ceux-ci sont le nombre de Reynolds turbulent ($Re_t = u' l_t / \nu$), le nombre de Damköhler ($Da = t_t / t_f$) qui compare les échelles de temps caractéristiques de la turbulence et de la chimie et le nombre de Karlowitz ($Ka = t_f / t_k$) qui compare les échelles de temps caractéristiques de la flamme et des plus petites structures turbulentes (échelles de Kolmogorov).

Les diagrammes de combustion prémélangée de Peters [23], de Borghi [33] et de Poinso *et al.* [32], tracés en fonction des paramètres décrits ci-dessus, sont ensuite présentés.

Le diagramme de combustion prémélangée de Peters et de Borghi

La figure 2.9 représente le diagramme de phases de Peters [23] et de Borghi [33] dont les axes sont le logarithme de l_t / l_f et le logarithme de u' / S_l . Les courbes $Re = 1$, $Da = 1$, $Ka = 1$ et $u' / S_l = 1$ sont tracées et selon les auteurs, elles séparent les différents régimes de combustion. Dans le contexte de la modélisation de la combustion turbulente à l'aide des flammelettes, le régime laminaire $Re < 1$ et le régime de réacteur bien mélangé (combustion distribuée) n'ont pas d'intérêt.

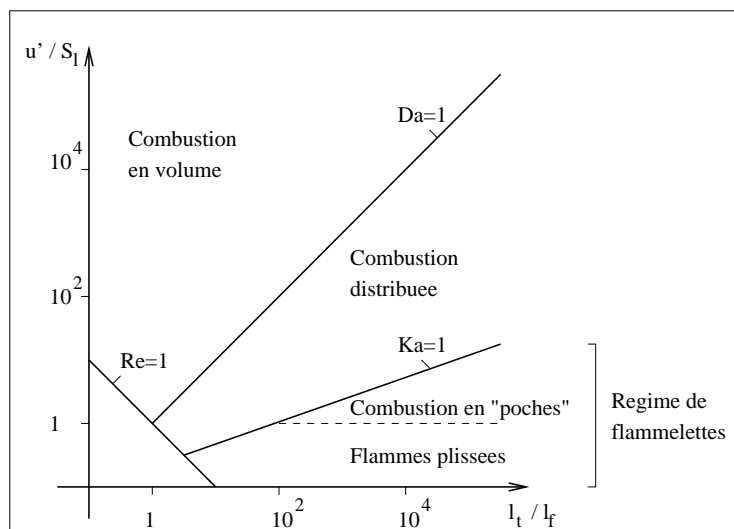


Figure 2.9 : Diagramme de combustion prémélangée. D'après Peters et Borghi.

Pour que la flamme se trouve dans le régime de flammelettes, il faut que la chimie soit rapide par rapport au temps turbulent ($Da > 1$) et que la structure de la flamme ne puisse pas être détruite par des étirements trop importants. Pour cela, le temps turbulent caractéristique des plus petites structures t_k , doit être supérieur au temps chimique ($Ka < 1$, critère de Klimov-Williams).

Le régime de flammelettes doit être séparé entre le régime de flammes plissées et la combustion "en poches" avec plusieurs fronts de flamme [18]. Les flammes plissées sont caractérisées par $u'/S_l < 1$. Le front de flamme est très mince et presque laminaire [33]. Quand $u'/S_l > 1$, les grands tourbillons provenant des gaz frais peuvent plisser le front de flamme jusqu'à ce que les fronts voisins puissent interagir entre eux et former ainsi des poches de gaz frais brûlant au sein des produits de la combustion.

Poinsot *et al.* [32] ont modifié ce diagramme de combustion à partir de résultats de simulation numérique directe en tenant compte de tous les phénomènes censés contribuer à l'extinction de la flamme. Leurs résultats sont l'objet de la section suivante.

Le diagramme de combustion prémélangée de Poinsot *et al.*

Le cas le plus simple pour étudier l'interaction entre la flamme et la turbulence est l'évaluation de l'action d'une paire de tourbillons contre-rotatifs sur une flamme laminaire, plane. Ce calcul DNS est aussi réalisable expérimentalement. A partir d'un diagramme spectral ainsi tracé, un diagramme de combustion turbulente prémélangée, présenté sur la figure 2.10, peut être créé [32].

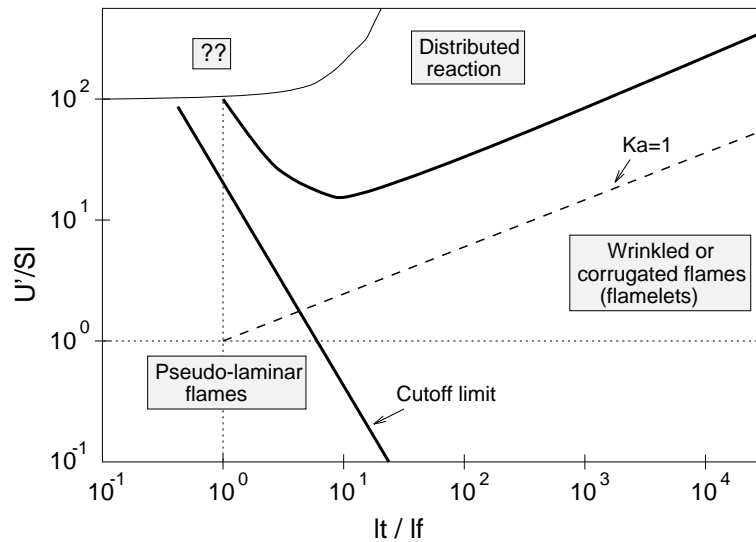


Figure 2.10 : Diagramme de combustion turbulente prémélangée, basé sur des résultats de DNS. D'après Poinsot *et al.*

Le diagramme de combustion obtenu permet de parvenir à la conclusion que le régime de flammelettes est en effet plus étendu que ce qui avait été prévu par Peters et par Borghi. Ceci est dû à des effets non stationnaires, au plissement et à la courbure du front de flamme et au fait que les tourbillons de petite taille sont rapidement détruits par la viscosité, avant que son action sur le front de flamme ne puisse se faire sentir (courbe de "cutoff").

Bibliothèques de flammelettes en combustion prémélangée

L'utilisation des modèles de flammelettes permet la création de bibliothèques qui regroupent les caractéristiques de la structure chimique des flammes laminaires étirées, leurs propriétés,

et leurs lois de comportement. Ces données sont alors couplées au champ turbulent de façon à obtenir la structure de la flamme turbulente.

Ces bibliothèques peuvent être obtenues analytiquement pour des configurations simples et une chimie à une étape, ou numériquement si l'étude devient plus complexe (souvent, avec une chimie à plusieurs espèces et étapes). La configuration de flamme laminaire la plus utilisée est celle d'une flamme stationnaire étirée dans son propre plan, avec les écoulements de gaz frais et de gaz brûlés à contre-courant (figure 2.11). Des écoulements de deux courants de gaz frais sont aussi utilisés avec deux flammes, chacune étant stabilisée du côté respectif du point de stagnation.

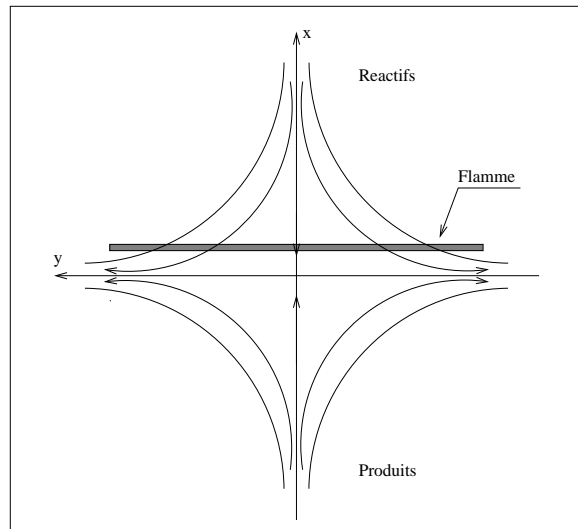


Figure 2.11 : Flamme laminaire de prémélange étirée avec écoulement des réactifs et des produits à contre-courant.

Nous avons vu à travers l'analyse de Poinsot *et al.* [32] que cette géométrie n'est pas toujours la plus adaptée aux problèmes pratiques. Elle ne fait pas intervenir les divers effets qui impliquent l'augmentation du domaine d'application du régime de flammelettes. Malgré cela, cette approche permet un traitement très acceptable du problème. Le tableau 2.2 résume les principales différences entre la configuration simple décrite et la flamme réelle.

2.4.2 Modèles de flammelettes en combustion prémélangée

Le modèle EBU "Eddy-Breakup"

Le modèle "Eddy-Breakup" de Spalding [34] a été l'une des premières tentatives d'inclusion des effets turbulents dans la description numérique de la combustion. Il a été conçu à partir d'une analyse intuitive de la combustion dans le cas $Da \gg 1$ et $Re \gg 1$. Le nombre de Reynolds Re est caractéristique de l'écoulement global,

$$Re = \frac{U L}{\nu} \quad (2.37)$$

où U est la vitesse moyenne de l'écoulement et L est une longueur caractéristique de la géométrie du système.

Flamme laminaire étirée avec écoulement des réactifs à contre-courant	Flamme turbulente
Étirement constant et stationnaire	Étirement non stationnaire imposé par des tourbillons Tourbillons convectés par l'écoulement moyen, pouvant se dissiper par effets visqueux
Position de la flamme fixe	Flammes pouvant s'échapper des zones d'étirement élevé
Front de flamme plan	Front de flamme courbé par les tourbillons
Température des gaz brûlés imposée comme paramètre d'entrée du problème	Température des gaz brûlés non nécessairement égale à celle prise pour la bibliothèque

Tableau 2.2 : Différences entre les caractéristiques de la flamme de diffusion laminaire en contre-courant et les flammelettes laminaires censées représenter localement une flamme de diffusion turbulente réelle.

Il s'agit d'un modèle basé sur le concept de cascade d'énergie turbulente. Les grands tourbillons de gaz frais et de gaz brûlés sont fractionnés, donnant origine à des tourbillons de plus en plus petits jusqu'à la dissipation visqueuse où la perte d'énergie est maximale. Les "poches" plus petites qui résultent de ce processus ont suffisamment de surface de contact entre elles pour que les gaz brûlés puissent chauffer les gaz frais et les faire réagir. Le taux de réaction moyen est donc contrôlé par un temps turbulent caractéristique de la fragmentation des tourbillons de gaz frais τ_{EBU} et par les fluctuations de concentration du carburant,

$$\bar{\omega} = -\bar{\rho} C_{EBU} \frac{\sqrt{\overline{c'^2}}}{\tau_{EBU}} \quad (2.38)$$

c est une variable d'avancement de la réaction chimique qui vaut 1 dans les gaz brûlés et qui vaut 0 dans les gaz frais. Pour $Le = 1$ ($Le = \lambda/\rho C_p D$ est le nombre de Lewis),

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} = \frac{Y_F - Y_{F,u}}{Y_{F,b} - Y_{F,u}} \quad (2.39)$$

Les indices u et b indiquent respectivement les gaz frais et les gaz brûlés. Le taux de fragmentation des gaz frais est déterminé en fonction des grandeurs turbulentes k et ϵ ,

$$\tau_{EBU} = \frac{k}{\epsilon} \quad (2.40)$$

La constante C_{EBU} est de l'ordre de l'unité.

Les fluctuations de la variable c sont déterminées soit à l'aide d'une équation de transport du type 2.29, soit en utilisant le concept de flammelettes permettant de dire que la flamme est

suffisamment mince pour que c ne puisse prendre que les valeurs 0 ou 1. Dans ce cas, il est possible de démontrer que

$$\widetilde{c}''^2 = \tilde{c}(1 - \tilde{c}) \quad (2.41)$$

Le modèle EBU ne fait pas intervenir la chimie. Son application est donc limitée. Cependant, son succès dans beaucoup d'applications pratiques démontre que la chimie peut souvent y être négligée.

Le modèle BML "Bray-Moss-Libby"

Depuis que Bray et Moss ont créé ce modèle [35], quelques formulations différentes ont été proposées [36, 37, 38, 39]. Nous présentons ici une formulation algébrique de Bray *et al.* [37] qui relie le taux de réaction moyen à la densité de surface de flamme Σ . Pour utiliser le concept de densité de surface de flamme, celle-ci est censée être suffisamment mince pour pouvoir être traitée comme une surface. La densité de surface de flamme représente alors la quantité de surface de flamme existant par unité de volume.

La densité de surface de flamme est liée au taux de réaction moyen à partir de l'expression,

$$\bar{\omega} = \omega_L \Sigma \quad (2.42)$$

où ω_L est le taux de consommation massique de carburant par unité de surface de flamme, censé être constant selon la direction perpendiculaire à la flamme (c variant entre 0 et 1). Cette grandeur est calculée généralement à l'aide de bibliothèques de flammes.

La densité de surface de flamme est calculée par,

$$\Sigma = \frac{g \tilde{c}(1 - \tilde{c})}{\sigma_y L_y} \quad (2.43)$$

La constante g est comprise entre 1 et 2 et la constante σ_y est un facteur d'orientation de la surface de flamme inférieur à 1 [38]. L'échelle de plissement du front de flamme L_y est en général déterminée par des expressions algébriques qui peuvent dépendre de l'échelle intégrale l_t ou même de la vitesse de flamme laminaire S_l . Ceci permet d'introduire des effets de chimie dans le modèle. On peut prendre par exemple l'expression [40],

$$L_y = \frac{S_l}{\Lambda} = \frac{S_l}{\frac{\epsilon}{k}} \quad (2.44)$$

L'hypothèse importante dans cette formulation est qu'il existe un équilibre dans tout le système entre la consommation et la production de densité de surface de flamme. Ceci permet d'éviter la résolution de l'équation de transport de la surface de flamme, objet de la prochaine section.

Modèle de flamme cohérente: Equation de transport de Σ

Le modèle de flamme cohérente est basé sur la résolution d'une équation de transport de la densité de surface de flamme à travers l'écoulement turbulent. Il cherche ainsi à intégrer des effets instationnaires et des effets de l'histoire de l'écoulement dans la modélisation du taux de réaction. Avec le modèle de flamme cohérente, le taux de réaction n'est plus une grandeur strictement locale, uniquement dépendante de la structure locale de l'écoulement.

L'écriture d'une équation de transport de la densité de surface de flamme a été proposée par Marble et Broadwell [26] pour les flammes de diffusion turbulentes. Le concept de densité de surface de flamme est exposé en détail par Darahiba *et al.* [41] et Pope [42]. Il a été décrit de manière formelle par Candel et Poinso [43] à partir du théorème du transport d'un volume déformable en mouvement. Trouvé et Poinso [44] ont poursuivi cette étude avec l'analyse de l'évolution d'une surface matérielle qui se propage dans un champ turbulent. Vervisch *et al.* [45], ont montré l'équivalence entre le concept de densité de surface de flamme et la propagation d'une fonction densité de probabilité. L'équation pour le transport de la densité volumique de surface de flamme issue de l'étude de Trouvé et Poinso est,

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tilde{u}_k \Sigma) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\langle u_k'' \rangle_s \Sigma) + \frac{\partial}{\partial x_k} (\langle w n \rangle_s \Sigma) = \langle A_t \rangle_s \Sigma + \langle a_t \rangle_s \Sigma + 2 \langle w H \rangle_s \Sigma \quad (2.45)$$

où n est le vecteur normal au front de flamme orienté vers les gaz frais, H est la courbure du front et w est la vitesse locale de propagation du front. $\langle \rangle_s$ représente une moyenne le long du front de flamme. Les quatre termes du membre de gauche traduisent respectivement la variation temporelle de densité de surface, son transport convectif par l'écoulement moyen, son transport diffusif et la propagation du front de flamme. Les trois termes source du côté droit représentent respectivement l'étirement dû à l'écoulement moyen, l'étirement turbulent et un effet combiné de propagation et de courbure:

$$\langle A_t \rangle_s = (\delta_{ij} - \langle n_i n_j \rangle_s) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \quad (2.46)$$

$$\langle a_t \rangle_s = \left\langle \delta_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} - n_i n_j \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \right\rangle_s \quad (2.47)$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

L'étirement est une mesure de la variation de la quantité de surface de flamme A au cours du temps et contrôle la production et l'extinction d'une flamme turbulente. Il s'agit d'un paramètre fondamental dans la modélisation de la combustion turbulente. Selon Candel et Poinso [43] l'étirement est défini par,

$$\Lambda = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt} \quad (2.48)$$

En général, l'étirement est calculé de manière algébrique à partir des valeurs provenant du modèle turbulent $k - \epsilon$. Quelques auteurs proposent $\Lambda = \sqrt{\epsilon/\nu}$ et d'autres $\Lambda = \epsilon/k$. Pour les premiers, la croissance de la surface de flamme est contrôlée par les petites échelles turbulentes ou de Kolmogorov et pour les derniers, par les grandes échelles turbulentes.

Certains doutes persistent sur le fait de savoir si l'équation 2.45 incorpore bien tous les effets importants concernant le développement de la densité de surface de flamme. Les termes d'étirement et de courbure doivent être modélisés en fonction des différentes grandeurs connues dans l'écoulement. Boudier *et al.* [46] et Duclos *et al.* [47] montrent des fermetures possibles pour ces termes. Dans Boudier *et al.* [46], l'équation de transport de la densité de surface de flamme est écrite sous la forme,

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tilde{u}_k \Sigma) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\Sigma} \frac{\partial \Sigma}{\partial x_k} \right) + \alpha \Lambda \Sigma - \beta \frac{\omega_L (1 + a\sqrt{k}/S_l)}{\bar{\rho} \tilde{Y}_F} \Sigma^2 \quad (2.49)$$

où ν_t est le coefficient turbulent de diffusion cinématique, σ_Σ est le nombre de Schmidt turbulent associé à la densité de surface Σ , Λ est le taux d'étirement turbulent, \tilde{Y}_F est la fraction massique moyenne de carburant, et k est l'énergie cinétique turbulente. Les paramètres α , β et a sont des constantes du modèle.

Dans l'équation de transport de la densité de surface de flamme de Boudier *et al.*, seul le terme de propagation dû à l'étirement induit par les fluctuations turbulentes est pris en compte ($\alpha \Lambda \Sigma$ avec $\Lambda = \epsilon/k$). Le terme de production de Σ dû à l'étirement du champ moyen est négligé. D'autres auteurs proposent des fermetures différentes [48, 49, 50, 51].

En ce qui concerne le terme de courbure, Boudier *et al.* considèrent que son seul effet est la destruction de la surface de flamme (dernier terme de droite de l'équation 2.49). Cependant, la courbure peut aussi avoir un effet de production de surface de flamme. Meneveau et Poinso [52] ont réussi, à l'aide de résultats de simulation numérique directe d'interaction flamme-tourbillon, à établir une nouvelle formulation du terme de production de Σ . Il s'agit du modèle ITNFS dont les propriétés sont les suivantes:

- Correction de l'étirement en fonction des échelles turbulentes les plus influentes sur le front de flamme.
- Inclusion des effets positifs de la courbure sur le front de flamme.
- Inclusion des effets non stationnaires, d'intermittence turbulente et de viscosité qui aident à la propagation du front de flamme.

La fonction f du modèle ITNFS traduit le rapport entre l'étirement Λ et les extensions turbulentes caractéristiques de grandes échelles ϵ/k ,

$$\frac{\Lambda}{\epsilon/k} = f \left(\frac{l_t}{l_f}, \frac{u''}{S_l} \right) \quad (2.50)$$

Finalement, la vitesse de consommation de la densité de surface de flamme ω_L (équation 2.42) est modélisée à l'aide de la vitesse de flamme laminaire S_l ,

$$\omega_L = \rho_u S_l \quad (2.51)$$

où ρ_u est la densité des gaz frais.

Le taux de réaction moyen est alors donné par l'expression,

$$\bar{\omega} = \omega_L \Sigma \quad (2.52)$$

L'équation 2.49 de transport de la densité de surface de flamme, fermée par Boudier *et al.*, a été implantée sur KIVA II MB pour la résolution de calculs moteurs, avec des résultats satisfaisants [53]. Duclos *et al.* [54] ont introduit des modifications sur l'équation 2.49 de manière à tenir compte de quelques effets initialement négligés. Il s'agit de l'interaction flamme-paroi, de l'initiation de la densité de surface de flamme et des effets d'expansion thermique dus au dégagement de chaleur important derrière le front de flamme.

2.4.3 Flammelettes et combustion non prémélangée

La combustion non prémélangée est caractérisée par l'arrivée simultanée des réactifs à la zone de réaction, contrôlée par le transport turbulent. Le temps caractéristique de ce transport est en général supérieur au temps chimique de la réaction. Le taux de réaction est donc déterminé par le taux de mélange turbulent entre le carburant et l'oxydant. Nous avons vu dans la section 2.3 que dans les études de flammes non prémélangées avec chimie non infiniment rapide, des problèmes apparaissent lors de la détermination des relations entre les variables thermodynamiques et les scalaires conservés. Les modèles de flammelettes aident à la résolution de ce problème.

Le succès rencontré dans la modélisation de la combustion prémélangée à l'aide des modèles de flammelettes a rendu envisageable son application aux flammes de diffusion [55]. Le premier problème qui se pose est la définition de flammelette dans ce cas. La séparation entre gaz frais et gaz brûlés par la flamme n'est plus possible et le concept de vitesse de flamme par rapport à l'écoulement de gaz frais n'a pas de sens. Ensuite, le choix des critères basés sur les différents paramètres de l'écoulement, qui permettent la détermination du domaine de combustion en régime de flammelettes n'est pas clair. Il faut refaire l'évaluation de ces différents régimes de combustion. Enfin, la nature d'une flamme de diffusion, très dépendante de la façon dont les réactifs arrivent à se rencontrer, n'assure pas que pour la même flamme, le même modèle soit valable partout [56] (il faut pouvoir prévoir la possibilité d'extinctions et d'allumages locaux, qui dépendent de l'écoulement).

Dans le cas de la flamme de diffusion, nous supposons que la zone de réaction sépare partout et en chaque instant le carburant de l'oxydant. Il s'agit d'une condition plus compliquée à vérifier que celle imposée dans le cas de la flamme de prémélange. En effet, il est beaucoup plus facile d'éteindre une flamme de diffusion qu'une flamme de prémélange qui est entretenue par son mécanisme de propagation. Par contre, pour une flamme de diffusion, d'une part l'étirement est essentiel à sa survie, mais d'autre part, s'il est trop fort, les pertes thermiques refroidissent la zone de réaction. La flamme n'a plus de source chaude pour amorcer la réaction à chaque instant et une extinction locale se produit.

Les difficultés présentées ont empêché pendant des années l'étude de la classification des régimes de combustion non prémélangée. Peters [23], Borghi [33] et Bilger [56] ont fait des essais dans ce domaine. L'étude de Borghi est basée sur une formulation identique à celle qui est utilisée dans l'étude des régimes de combustion en prémélange. Les mêmes paramètres sont utilisés mais des grandeurs comme la vitesse de propagation de flamme ou l'épaisseur de flamme

laminaire ont seulement un sens mathématique. Peters et Bilger cherchent à étudier la validité de l'application des flammelettes en fonction des valeurs de la fraction de mélange Z (définie dans la section 2.3) et de la dissipation scalaire χ (définie dans la section 2.2).

Dans ces deux approches [23, 56], le temps chimique est comparé à l'inverse de la dissipation scalaire, laquelle est considérée comme l'inverse de l'échelle de temps caractéristique des mécanismes de diffusion. Ceci est justifié par le fait que le taux de dissipation scalaire permet d'obtenir le taux de mélange entre deux espèces, problème fondamental dans l'étude des flammes de diffusion.

Williams [18] avait déjà essayé d'aborder l'étude du domaine de validité du concept de flammelettes dans les flammes de diffusion. En étudiant l'extinction d'une flamme de diffusion en fonction du nombre de Damköhler, il obtient une expression pour celui-ci qui fait intervenir la dissipation scalaire. Cette expression contient des effets qui agissent contrairement sur le front de flamme. Comme l'augmentation de la dissipation scalaire implique l'accroissement de la diffusion des espèces entre elles, le taux de réaction est ainsi augmenté. Cependant, si les espèces se mélangent trop vite, la chimie ne peut plus accompagner la réduction du temps de mélange et la flamme s'éteint soudainement. Le même problème a été aussi étudié par Liñan [20] qui donne des critères d'extinction d'une flamme de diffusion laminaire à contre-courant en fonction d'un nombre de Damköhler. Cette étude est analysée en détail dans l'annexe C.

Régimes de combustion non prémélangée selon Peters

Peters [23] commence par écrire l'équation de transport de la concentration des espèces chimiques dans un système de coordonnées liées à la surface où le mélange carburant-oxydant est stoechiométrique. La concentration et la température sont écrites en fonction de la fraction de mélange. Le concept de flammelettes mène alors à une structure unidimensionnelle, perpendiculaire à cette surface. Les flammelettes déterminent la zone de réaction de faible épaisseur, qui est entourée par deux couches de gaz chimiquement inactifs.

La dissipation scalaire est évaluée aux endroits où le mélange est stoechiométrique ($Z = Z_{st} \Rightarrow \chi_{st}$) et le domaine d'application des flammelettes est étudié en fonction de cette valeur. La courbe de température maximale de la réaction chimique (figure 2.12) est obtenue en faisant varier la valeur de χ_{st} (il s'agit de la même courbe de Liñan [20]).

La combustion des flammelettes correspond à la branche supérieure de la courbe. En augmentant χ_{st} , la température maximale de la réaction diminue car les pertes de chaleur augmentent. En arrivant à la valeur critique χ_q , la flamme s'éteint. La branche inférieure de la courbe correspond à un processus d'auto-inflammation d'une flamme de diffusion (point I).

Régimes de combustion non prémélangée selon Bilger

Bilger [57] part du principe qu'il est nécessaire que la zone de réaction soit moins épaisse que l'échelle de turbulence la plus petite (critère du type $Ka < 1$, où Ka est le nombre de karlovitz), pour que le concept de flammelettes soit applicable aux flammes de diffusion. Ensuite, il cherche à élargir ce domaine et à expliquer pourquoi dans des cas où les critères d'utilisation des flammelettes ne sont pas respectés, les résultats des calculs restent cependant acceptables.

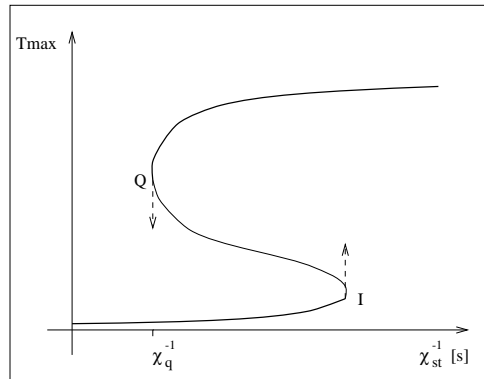


Figure 2.12 : Température maximale de la réaction en fonction de la dissipation scalaire dans les endroits à $f = f_{st}$ pour une flamme de diffusion. Le point Q correspond à l'extinction de la flamme et le point I à un allumage spontané. D'après Peters.

Bibliothèques de flammelettes en combustion non prémélangée

La résolution du problème de la dépendance des variables de l'écoulement par rapport à un scalaire passif passe par la détermination de bibliothèques de flammelettes. Le comportement des flammes de diffusion laminaires et étirées doit être analysé dans des configurations simples avec des schémas cinétiques plus ou moins compliqués. De nouveau, la configuration de la flamme ainsi que le type de chimie à utiliser sont les paramètres à prendre en compte.

L'approche classique utilisée par plusieurs auteurs [22, 26] est l'utilisation de la flamme de diffusion laminaire stationnaire et étirée, avec l'écoulement des réactifs en contre-courant (figure 2.13).

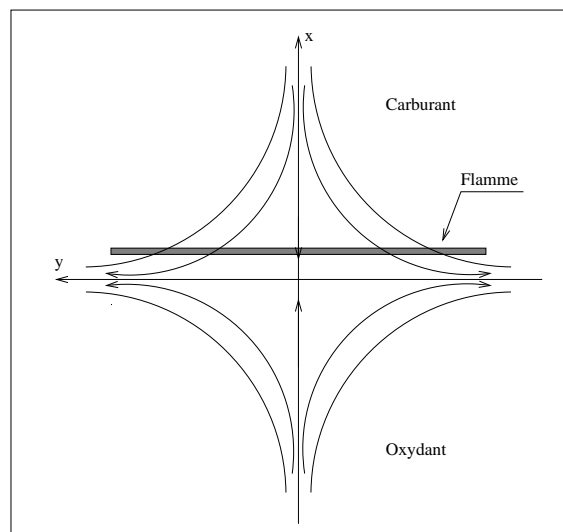


Figure 2.13 : Flamme laminaire étirée avec l'écoulement des réactifs à contre courant.

La réaction chimique (en équilibre) est censée se dérouler à une vitesse très grande, c'est à dire, le temps caractéristique des réactions est beaucoup plus petit que le temps de mélange entre les réactifs. La structure de la flamme turbulente est alors contrôlée par les mêmes lois

qui régissent le comportement de la flamme de diffusion laminaire. Plusieurs auteurs ont étudié ce problème théoriquement et numériquement [58, 59, 60], ainsi qu'expérimentalement [61]. Peters [22] conseille l'utilisation de cette configuration, car le problème stationnaire à résoudre peut être traité expérimentalement. Aussi, le profil de la dissipation scalaire en fonction de la fraction de mélange est proche de celui caractéristique des couches de mélange non stationnaires. Peters [22] considère que les deux propriétés mentionnées sont fondamentales pour le type d'étude effectué.

D'autres types de flammelettes laminares peuvent cependant être utilisés [4, 60]; par exemple, des flammes courbées ou des flammes non stationnaires étirées ou non étirées. Cuenot et Poinso [60] montrent que les relations,

$$\begin{aligned} T &= F(Z, \chi_f) \\ Y_j &= F_j(Z, \chi_f) \end{aligned}$$

où T est la température, Y_j est la fraction massique de l'espèce j , Z est un scalaire qui se conserve, χ_f est le taux de dissipation scalaire maximum au long du front de flamme et les fonctions F et F_j sont indépendantes des flammes utilisées. La tradition et la simplicité font cependant que la flamme de diffusion laminaire stationnaire et étirée soit la plus utilisée. Les flammes non stationnaires sont intéressantes dans les problèmes où les flammelettes n'ont pas le temps de s'adapter aux conditions locales de l'écoulement.

Un exemple de calcul du taux de consommation des réactifs par unité de surface est présenté dans l'annexe A. Le cas le plus simple de la flamme laminaire étirée stationnaire est considéré. Le problème est traité en prenant d'abord la densité comme une constante et ensuite, le cas plus réaliste de la densité variable. Les résultats ont une forme équivalente sauf en ce qui concerne la densité qui dans le second cas prend sa valeur à la flamme. A partir des calculs de Cuenot et Poinso [60] et de la définition de taux de consommation des réactifs par unité de surface, d'autres type de problèmes peuvent être traités.

Nous présentons ensuite quelques modèles de combustion non prémélangée, basés sur les concepts de flammelettes. Ces modèles peuvent être intégrés dans des mécanismes globaux de simulation de la combustion Diesel.

Modèle à chimie infiniment rapide

Bilger [16] et Williams [18] présentent une méthode pour calculer le taux de réaction moyen basée sur la validité de l'approche par des scalaires passifs et en supposant que la chimie est infiniment rapide.

L'équation 2.8 peut être écrite sur la forme suivante:

$$\dot{\omega}_j = \frac{\partial \rho Y_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Y_j}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial Y_j}{\partial x_k} \right) \quad (2.53)$$

Si les coefficients de diffusion associés aux espèces j sont égaux, alors la fraction de mélange peut être définie et les Y_j peuvent être exprimées par des fonctions de cette variable. De plus, si les

réactions chimiques sont en équilibre, ces fonctions sont connues (équation 2.21). L'équation 2.53 devient:

$$\dot{\omega}_j = \frac{dY_j}{dZ} \left[\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_k Z}{\partial x_k} - \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_k} \right) \right] - \rho D |\nabla Z|^2 \frac{d^2 Y_j}{dZ^2} \quad (2.54)$$

Comme la fraction de mélange est un scalaire conservé, le terme entre crochets dans l'équation 2.54 est nul. Le taux de réaction instantané dans un écoulement turbulent où les hypothèses qui permettent l'écriture de l'équation 2.54 sont valables est donc:

$$\dot{\omega}_j = -\rho D |\nabla Z|^2 \frac{d^2 Y_j}{dZ^2} \quad (2.55)$$

Cette équation est appelée équation des flammelettes [22]. Nous remarquons que l'équation du taux de réaction écrite en fonction de la fraction de mélange ne contient pas de terme convectif. En effet, tous les scalaires passifs sont convectés de manière identique et donc, aucun terme de convection n'apparaît par rapport à cette variable. Tous les effets de l'écoulement sont intégrés dans le terme $\rho D |\nabla Z|^2$, proportionnel à la dissipation scalaire.

L'équation 2.55 permet de constater que le taux de réaction moyen ne peut pas être exprimé comme une fonction unique de Z . Même si le terme $d^2 Y_j / dZ^2$ ne dépend que de Z , le terme $D |\nabla Z|^2$ est proportionnel à la dissipation scalaire (χ). Une *pdf* jointe de Z et de χ est donc nécessaire à la détermination du taux de réaction moyen.

$$\bar{\omega}_j = -\frac{1}{2} \int_0^1 \int_0^\infty \rho \chi \frac{d^2 Y_j}{dZ^2} P(\chi, Z) d\chi dZ \quad (2.56)$$

L'hypothèse de chimie infiniment rapide, fondée sur le concept de flammelettes, sert à déterminer la dépendance des Y_j en Z . Nous pouvons alors utiliser les expressions 2.21 et 2.22 et dans ce cas, $d^2 Y_j / dZ^2$ est proportionnelle à $\delta(Z - Z_{st})$ (fonction de Dirac, centrée sur la fraction de mélange stoechiométrique Z_{st}). Si l'espèce j est identifiée avec le carburant F ,

$$\frac{d^2 Y_F}{dZ^2} = \frac{Y_{F,0}}{1 - Z_{st}} \delta(Z - Z_{st}) \quad (2.57)$$

Il ne reste que la détermination de $P(\chi, Z)$ pour que le système soit fermé. Malheureusement, $P(\chi, Z)$ n'a pas une forme simple et ne peut pas être exprimée analytiquement. D'un point de vue de la géométrie de la zone de réaction, l'hypothèse de flammelettes équivaut à dire que toute l'épaisseur de la zone réactive est ramenée à une iso-surface de fraction de mélange correspondant à la valeur stoechiométrique. La fonction $P(\chi, Z)$ n'a donc besoin d'être déterminée que dans les points où $Z = Z_{st}$. Il est possible de montrer que,

$$P(\chi, Z_{st}) = P(\chi | Z_{st}) \cdot P(Z_{st}) \quad (2.58)$$

où $P(\chi | Z_{st})$ est la probabilité de trouver des valeurs de χ , conditionnée aux points stoechiométriques.

L'équation 2.56 s'écrit alors,

$$\bar{\omega}_F = -\frac{1}{2} \frac{Y_{F,0}}{1 - Z_{st}} \int_0^1 \rho \delta (Z - Z_{st}) dZ \int_0^\infty \chi P(\chi | Z_{st}) d\chi \quad (2.59)$$

Or, le terme $\int_0^\infty \chi P(\chi | Z_{st}) d\chi$ représente précisément la dissipation scalaire moyenne évaluée sur la flamme $\tilde{\chi}_{st}$. L'expression finale du taux de réaction moyen caractéristique de la flamme de diffusion turbulente en chimie infiniment rapide est donc:

$$\bar{\omega}_F = -\frac{1}{2} \bar{\rho}_{st} \tilde{\chi}_{st} \frac{Y_{F,0}}{1 - Z_{st}} P(Z_{st}) \quad (2.60)$$

Modèle RIF: "Representative Interactive Flamelet"

L'équation 2.55 peut être résolue dans un écoulement laminaire simple (écoulement de deux espèces réactives en contre-courant, figure 2.13), avec de la chimie plus ou moins complexe. La dépendance de chacune des espèces Y_j de la fraction de mélange (les fonctions $Y_j(Z)$) est ainsi déterminée et une bibliothèque de flammelettes laminaires est créée. Cette équation, écrite en mode stationnaire, part du principe que le temps de réponse de la flammelette par rapport à l'écoulement est infiniment petit. Les profils de flammelettes obtenus sont donc quasi-stationnaires.

Pitsch *et al.* [62, 63] supposent, au contraire, que les flammelettes ont un temps de réponse fini face aux changements de l'écoulement et que donc, des solutions instationnaires de l'équation 2.55 doivent être prises en compte. L'équation à résoudre est dans ce cas,

$$\dot{\omega}_j = \rho \frac{\partial Y_j}{\partial t} - \rho D |\nabla Z|^2 \frac{d^2 Y_j}{dZ^2} \quad (2.61)$$

Evidemment, des bibliothèques de flammelettes ne peuvent plus être utilisées, car leur structure et propriétés changent au cours du temps. L'équation 2.61 doit alors être résolue à chaque pas de temps de façon interactive avec l'écoulement. Ceci est le principe du modèle RIF. Un code de résolution de la structure de flammelettes laminaires non stationnaires est couplé à un code CFD ("Computational Fluid Dynamics") qui calcule les différentes grandeurs moyennes. Lors du pas de temps suivant, ces valeurs moyennes des variables de l'écoulement servent à l'initialisation du calcul de flammelettes. Les nouvelles valeurs des $Y_j(Z)$ sont multipliées par une *pdf* présumée de Z (une fonction β) et le résultat est intégré dans l'espace de la fraction de mélange selon l'équation 2.26. Les nouvelles concentrations moyennes $\tilde{Y}_j(Z)$ sont ainsi déterminées. Selon les auteurs, le modèle est aussi applicable pendant la phase d'allumage que pendant la phase de combustion haute température.

Modèle de flamme cohérente et flammes de diffusion

Veynante [64], Lacas [65] et Fichot [66] ont étudié l'application du modèle de flamme cohérente aux flammes de diffusion. Marble et Broadwell avaient conçu ce modèle sur des idées très intuitives, partant d'une analyse physique, purement phénoménologique. L'écoulement est divisé en deux régions distinctes, chacune contenant l'un des réactifs séparé de l'autre par la surface de flamme. Cette surface est, comme toute autre grandeur présente dans l'écoulement, convectée par le champ de vitesses et diffusée grâce à la viscosité turbulente. Une distribution de flammelettes laminaires compose la surface de flamme. Ces structures peuvent être distordues et

étirées par la turbulence, mais elles conservent toujours leur identité, d'où le nom de structures cohérentes.⁴

Le taux de réaction moyen correspondant à l'espèce j est à nouveau calculé par le produit entre une vitesse massique de consommation de l'espèce j et une densité de surface de flamme Σ ,

$$\bar{\omega}_j = \bar{\rho} V_{d_j} \Sigma \quad (2.62)$$

La densité de surface de flamme est déterminée à partir de son équation de transport au sein de l'écoulement turbulent. Sa forme modélisée ressemble à l'équation 2.49,

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k} (\tilde{u}_k \Sigma) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\nu_t}{\sigma_\Sigma} \frac{\partial \Sigma}{\partial x_k} \right) + \alpha \Lambda \Sigma - \beta \left(\frac{V_{d_F}}{\tilde{X}_F} + \frac{V_{d_O}}{\tilde{X}_O} \right) \Sigma^2 \quad (2.63)$$

où V_{d_F} et V_{d_O} sont respectivement les taux de consommation de carburant et d'oxydant par unité de surface de flamme. Un terme source de production de densité de surface de flamme et un terme de destruction de surface de flamme interviennent dans cette formulation. Ils cherchent à regrouper les différents effets de l'écoulement sur la surface de flamme. Le terme de production fait intervenir l'étirement subi par la flamme. Il est proportionnel à $\Lambda \Sigma$, ce qui est en accord avec l'hypothèse que l'évolution d'une surface matérielle d'épaisseur nulle et de capacité d'étirement infinie au cours du temps est du type exponentiel [43]. Le terme de destruction tient compte de la possibilité que dans une unité de volume, la distance entre deux parties adjacentes de surface devienne du même ordre de grandeur que l'épaisseur de la zone occupée par la flamme. Ces flammes interagissent et consomment de manière très rapide les réactifs qui s'interposent, en participant ainsi à la destruction de la surface de flamme. Le terme de destruction est inversement proportionnelle aux concentrations des espèces réactives.

Tout comme l'équation 2.49, l'équation 2.63 ne contient qu'un terme de production et un terme de destruction de la densité de surface de flamme. Comme pour la combustion prémélangée, le développement du modèle de flamme cohérente dans le cas de la combustion non prémélangée passe par l'établissement et l'étude exhaustive de l'équation exacte de transport de la densité de surface d'une flamme de diffusion (équation du même genre que l'équation 2.45). Plusieurs études récentes ont abordé le sujet [47, 67, 68].

2.4.4 Modélisation de la combustion dans un moteur Diesel

Nous présentons ensuite quelques modèles couramment utilisés dans la modélisation de la combustion Diesel. Ces modèles intègrent quelques unes des idées et concepts décrits dans les sections précédentes.

Heywood [1] a fait remarquer que la combustion dans un moteur Diesel ne devrait pas être étudiée comme une combustion non prémélangée pure. En effet, le délai d'auto-allumage qui résulte de l'évaporation du combustible et du processus d'auto-inflammation permet aux gaz de se mélanger. La conséquence est l'existence d'une flamme de prémélange au début de la combustion qui donne origine à la flamme de diffusion qui suit. Des études expérimentales [69, 70] ainsi que des études de simulation numérique directe [3] confirment

⁴Le principe de l'application du concept de flammellettes à la formulation du modèle est le même que celui qui a été utilisé lors des études de combustion prémélangée

les observations de Heywood [1]. Nous présentons ensuite quelques modèles qui traitent le processus de combustion mixte prémélange-diffusion dans les moteurs Diesel.

Modèle "Eddy-Breakup" de Magnussen et Hjertager

Le modèle de combustion de Magnussen et Hjertager [71], part du même principe que le modèle EBU appliqué à la combustion prémélangée. Il a été un des premiers modèles algébriques à être utilisé pour la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel. Dans ce modèle, l'hypothèse est faite que le carburant et l'oxydant se trouvent à l'intérieur de différents tourbillons. Le taux de réaction est calculé à partir du taux de dissipation de ces tourbillons ϵ/k . Par hypothèse, en chaque point il y a une relation entre les fluctuations de carburant et d'oxydant et leurs concentrations moyennes. Comme le modèle EBU, le modèle de Magnussen et Hjertager est un modèle purement turbulent qui ne tient pas compte de la cinétique chimique.

Le taux de réaction moyen de consommation de carburant est calculé par,

$$\bar{\omega}_F = A \tilde{Y}_F \frac{\epsilon}{k} \quad (2.64)$$

où A est une constante qui dépend de la structure de la flamme.

Si l'oxydant manque dans une certaine région du domaine, alors c'est sa concentration qui contrôle le taux de réaction à cet endroit,

$$\bar{\omega}_F = A \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{r} \frac{\epsilon}{k} \quad (2.65)$$

Si le carburant et l'oxydant se retrouvent partiellement ou complètement mélangés, il n'y aura pas de distinction entre les tourbillons contenant l'un ou l'autre. Dans ce cas, les tourbillons de gaz prémélangé sont séparés des tourbillons de produits de réaction chauds. Le taux de réaction est alors contrôlé par le taux de dissipation des tourbillons qui contiennent les produits,

$$\bar{\omega}_F = A \cdot B \frac{\tilde{Y}_P}{1+r} \frac{\epsilon}{k} \quad (2.66)$$

où B est une deuxième constante du modèle. L'introduction de la concentration de gaz brûlés dans l'expression du taux de réaction apporte une information supplémentaire et indispensable au modèle, celle de la température. En effet, une flamme ne peut exister que si la température est suffisamment élevée. Or, la simple évaluation du taux de réaction en fonction des concentrations de carburant et d'oxydant implique que sa valeur sera supérieure à zéro lorsqu'ils seront mis ensemble. Comme l'existence de produits est liée à une température élevée, cette dernière condition doit alors être respectée pour que la réaction puisse avoir lieu. Rappelons que l'on se place dans un régime de flammelettes, où la turbulence ne doit pas interagir avec la structure interne du front de flamme. Il ne faut donc pas appliquer ce modèle pendant l'auto-inflammation, ce qui est d'une certaine façon imposé par l'introduction du terme \tilde{Y}_P . Des modèles du type de ceux présentés dans la section 2.2 doivent être utilisés pendant cette période.

A chaque pas de temps de calcul, les trois termes sont calculés. Le plus petit sera considéré comme le taux de réaction effectif,

$$\bar{\omega}_F = \bar{\rho} A \frac{\epsilon}{k} \min \left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{r}, B \frac{\tilde{Y}_P}{1+r} \right) \quad (2.67)$$

Pinchon [72] a effectué des calculs de combustion dans un moteur Diesel à injection indirecte avec le modèle de Magnussen et Hjertager. Le modèle cinétique de l'IFP a été utilisé pour simuler la phase d'auto-allumage. Les résultats obtenus ont montré que le modèle respecte les tendances des différentes évolutions étudiées. Cependant, des problèmes ont été rencontrés pendant la première phase de la combustion où une combustion en prémélange est plutôt dominante. Il faut aussi remarquer que les calculs de la combustion dans les moteurs Diesel sont affectés par le traitement du jet liquide qui n'est pas encore bien maîtrisé par la modélisation.

Modèle du temps caractéristique de Reitz

Abraham *et al.* [73] ont conçu un modèle de combustion prémélangée, lui aussi basé sur le concept EBU. Les bons résultats obtenus ont poussé Kong *et al.* [74] à l'adapter à la combustion dans les moteurs Diesel. Le taux de réaction est donné par l'expression,

$$\bar{\omega}_j = \frac{\tilde{Y}_j - Y_{j,eq}}{\tau_c} \quad (2.68)$$

où $Y_{j,eq}$ est la fraction massique locale d'équilibre thermodynamique de l'espèce j et τ_c est le temps caractéristique pour parvenir à cet équilibre. L'équilibre thermodynamique est déterminé à partir de la réaction chimique du carburant avec l'air, faisant apparaître plusieurs produits de réaction (CO_2 , CO , H_2O , H_2).

Le temps caractéristique τ_c est la somme d'un temps caractéristique laminaire avec un temps caractéristique de l'écoulement turbulent.

$$\tau_c = \tau_l + f \tau_t \quad (2.69)$$

où le coefficient de retardement f contrôle l'influence des phénomènes turbulents. Le temps laminaire est calculé à l'aide d'une expression d'Arrhenius, dont le coefficient pré-exponentiel et l'énergie d'activation sont déterminés à partir des expériences d'auto-allumage d'une gouttelette en milieu oxydant. Le temps turbulent caractéristique est proportionnel à l'inverse du taux de dissipation ϵ/k . La constante de proportionnalité dépend du modèle de turbulence utilisé.

Le degré d'influence de la turbulence sur la combustion est donné par le coefficient de retardement f ,

$$f = \frac{1 - e^{-r}}{0.632} \quad (2.70)$$

où r est l'avancement de la réaction chimique, traduit par le rapport entre la quantité de produits et de réactifs (r a la même nature que la variable c dans l'équation 2.39). La combustion démarre à partir de phénomènes purement laminaires. La forme exponentielle du coefficient f

implique un effet de plus en plus fort de la turbulence au fur et à mesure de l'évolution de la consommation des réactifs.

Ce modèle considère que la phase de combustion prémélangé dans un moteur Diesel n'est influencée que par la cinétique chimique. Cependant, la manière dont le temps chimique est calculé ne permet pas le calcul de l'auto-inflammation. Si ce paramètre était calculé en fonction d'une cinétique chimique adaptée à cette période (modèle Shell ou IFP décrits dans la section 2.2), l'utilisation de deux modèles distincts pourrait être évitée. La turbulence n'a de l'importance que quand la taille de la zone de réaction atteint une certaine valeur. En ce moment, une hypothèse de flammes permet de dire que le taux de réaction est contrôlé uniquement par l'étirement lié aux plus grandes échelles turbulentes ϵ/k .

Les résultats obtenus avec ce modèle, appliqué à l'étude de la combustion Diesel dans des moteurs modifiés, sont de bonne qualité. Il faut cependant, que les paramètres de composition et de comportement du jet liquide soient ajustés en fonction du cas calculé. Le modèle dépend aussi fortement de la valeur de la constante multiplicative du terme ϵ/k .

Modèle de Musculus et Rutland

Les modèles antérieurs sont tous basés sur le même concept de temps caractéristique. Le paramètre de contrôle est toujours le taux de dissipation des tourbillons contenant les réactifs.

Musculus et Rutland [75] ont conçu un modèle mixte de prémélange-diffusion qui tient compte des différents phénomènes qui se déroulent dans un moteur Diesel. Le modèle traite d'abord l'évaporation des gouttelettes provenant du jet liquide et son mélange avec l'air. Ensuite les calculs de combustion sont effectués, d'abord l'auto-allumage, ensuite la combustion prémélangée et enfin la flamme de diffusion.

Ce modèle est plus élaboré, car il fait intervenir une équation de transport de densité de surface de flamme et une équation de transport de carburant prémélangé. Le problème de la formation du mélange doit en conséquence être résolu.

Les calculs d'auto-allumage sont effectués à l'aide du modèle cinétique Shell [9]. Pour le passage du modèle d'auto-allumage vers la combustion prémélangée, un critère mixte de température critique et de chaleur libérée pendant l'auto-inflammation est utilisé. La combustion prémélangée est traitée à l'aide d'un modèle du type Magnussen conçu par Patterson et al. [39]. Au contraire de ce qui se passe dans le modèle de Magnussen, le temps caractéristique n'est pas contrôlé par la turbulence mais par une réaction cinétique globale dont l'inverse de l'échelle de temps est,

$$\dot{\omega}_{pm} = A Y_F^{1/4} Y_O^{3/2} e^{-E_a/RT} \quad (2.71)$$

La transition entre l'auto-inflammation et la combustion à haute température est faite maille par maille selon un critère basé sur un nombre de Damköhler,

$$Da = \frac{A e^{-E_a/RT}}{\epsilon/k} \quad (2.72)$$

Ceci est justifié par les critères établissant les diagrammes de combustion non prémélangée (section 2.4). En effet, il a été vu que le domaine d'application des concepts de flammelettes dépend du nombre de Damköhler. Si le rapport entre le temps turbulent caractéristique et le temps chimique caractéristique est suffisamment élevé, alors localement la flamme conserve sa structure de flammelettes laminaires et le modèle de flamme cohérente adapté aux flammes de diffusion est applicable. Une équation pour le transport de la densité de surface de flamme de diffusion du type 2.63 est alors résolue.

Pour la formation des gaz prémélangés qui s'auto-allument, l'hypothèse est faite que le carburant évaporé à partir des gouttelettes liquides est immédiatement mélangé avec l'air. Lorsque la flamme de diffusion est établie, il n'y a plus de formation de mélange. Il est imposé que le carburant ne peut alors exister que du côté "carburant" de la flamme de diffusion. Cette hypothèse implique que la résolution de l'équation de transport de l'oxydant prémélangé n'est pas nécessaire, car il ne peut exister que du côté oxydant de la flamme. Aussi, la flamme de diffusion, une fois établie, va se placer à la frontière des gouttelettes liquides, car par principe, l'oxydant ne peut pas exister au sein du carburant. Il s'agit d'une hypothèse importante, qui correspond à la situation de chimie infiniment rapide étudiée auparavant. Elle est justifiée si le nombre de Damköhler est élevé, c'est à dire que la chimie est rapide devant la diffusion turbulente. La probabilité pour qu'il n'y ait pas de carburant du coté oxydant est alors élevée. Une fois que la flamme de diffusion est allumée, le terme source associé à l'évaporation dans l'équation de transport de carburant prémélangé est annulé. A partir de cet instant, dans les mailles où la flamme de diffusion existe, le carburant évaporé est alors immédiatement brûlé par ce mécanisme.

2.5 Modèle à trois équations de transport de surface

Pour compléter l'étude des modèles utilisés pour la simulation de la combustion dans les moteurs Diesel, nous présentons dans cette section le modèle à trois équations de transport de surface. Il cherche à représenter de façon fidèle et continue tous les phénomènes qui ont lieu lors de la combustion Diesel. Le modèle est fondé sur le concept de flammelettes. Trois surfaces sont définies à l'image des surfaces de flamme du modèle CFM étudié auparavant. Elles représentent respectivement le mélange, la flamme de prémélange et la flamme de diffusion. Les densités volumiques de ces surfaces sont transportées par l'écoulement selon la manière décrite dans le modèle de flamme cohérente.

Fichot [66] avait déjà étudié différents schémas de combustion mixte. Il a proposé d'abord un modèle à une seule équation de transport de surface de flamme. Ensuite, pour reproduire de façon plus fidèle les divers mécanismes présents, il a utilisé un modèle à trois équations de transport de surface conçu par Veynante *et al.* [76]. C'est ce modèle qui fait l'objet de cette section.

La combustion turbulente est décrite à partir de deux équations de transport de la densité de surface de flamme, une pour la flamme de prémélange et l'autre pour la flamme de diffusion. Une troisième équation de transport de densité d'une surface non réactive, la surface de contact, est utilisée pour le calcul du mélange turbulent.

Différentes applications de ce modèle peuvent être trouvées dans la littérature. Fichot [66] a appliqué le modèle à trois équations à une flamme née de l'injection d'hydrogène dans un courant d'air avec une chambre de combustion en parallélépipède. Dillies *et al.* [77] l'ont implanté dans KIVA II et ils l'ont utilisé pour étudier plusieurs cas moteurs. Les équations du modèle à trois surfaces qui sont ici étudiées sont celles écrites par Dillies [77] et Dillies *et al.* [78].

La figure 2.14 représente l'interprétation du modèle à trois surfaces de la combustion Diesel (les échelles de la figure ne traduisent pas la réalité). La réaction chimique entre le carburant F et l'oxydant O est considérée comme rapide et irréversible, du type $F + rO \rightarrow P$. Le carburant et l'oxydant sont initialement séparés par une surface nommée surface de contact Σ_c (figure 2.14a). Ils diffusent l'un vers l'autre donnant naissance à une certaine quantité de gaz prémélangé (figure 2.14b). L'auto-allumage du gaz prémélangé fait apparaître une flamme de prémélange Σ_p qui se propage rapidement dans ses limites d'inflammabilité (figure 2.14c). Comme le carburant et l'oxydant continuent à être apportés vers la zone de mélange, la flamme de prémélange allume une flamme de diffusion Σ_d (figure 2.14d). Une fois que le gaz initialement prémélangé est consommé et si la chimie est suffisamment rapide devant le temps de diffusion turbulente des espèces réactives, une flamme de diffusion subsiste à l'endroit où le carburant et l'oxydant se retrouvent en proportion stoechiométrique (figure 2.14e).

L'utilisation du modèle de flamme cohérente pendant toutes les phases du calcul implique la validité des hypothèses de flammelettes. Cette image de la combustion Diesel est débattue dans ce chapitre.

2.5.1 Conception du modèle

Dans le modèle à trois surfaces, l'équation de transport de la surface de contact est résolue à partir de l'instant où les réactifs sont mis en contact l'un avec l'autre. La résolution des deux

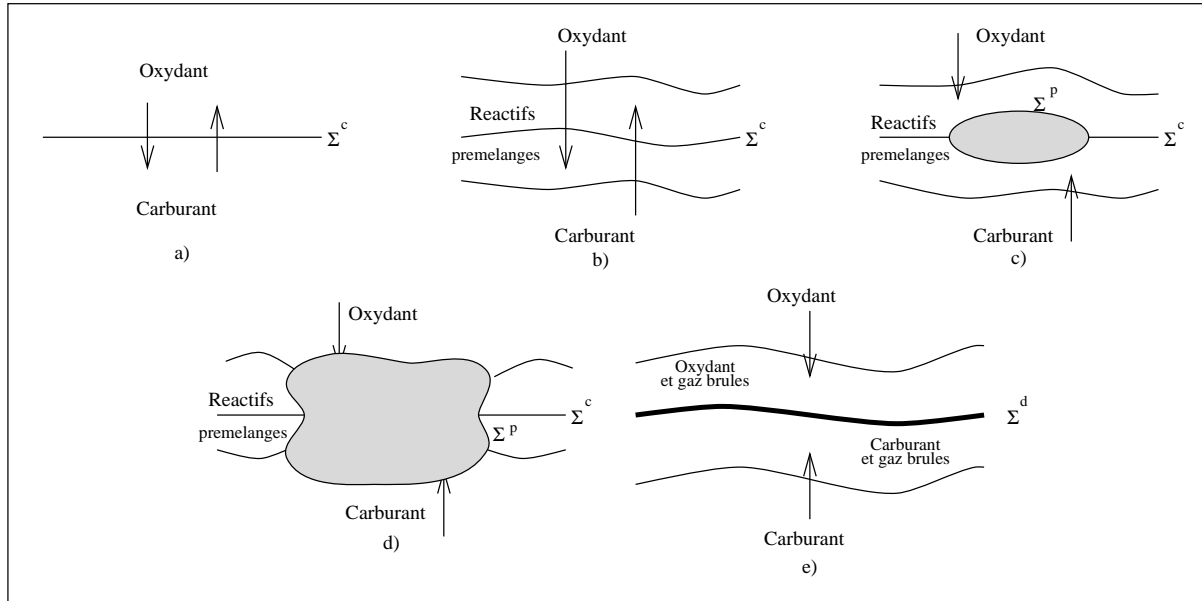


Figure 2.14 : Représentation schématique des processus physiques présents dans le modèle à trois surfaces; a) surface de mélange séparant carburant et oxydant; b) formation d'une zone de gaz prémélangé; c) allumage et propagation d'une flamme de prémélange; d) établissement de la flamme de diffusion; e) flamme de diffusion établie.

équations de transport de densité de surface de flamme ne débute qu'après l'auto-allumage, lorsque les conditions pour qu'une flamme de prémélange se propage sont réunies.

La surface de contact est la mesure des quantités de carburant et d'oxydant qui peuvent se mélanger à un instant et à une position données. Les réactifs initialement séparés traversent cette surface et sont transformés en réactifs prémélangés. Pour que la surface de contact ait une signification physique, elle doit être vue comme une surface d'iso-concentration convectée, diffusée et étirée par l'écoulement turbulent. Ce sont le carburant et l'oxydant prémélangés qui participent au mécanisme d'auto-allumage.

Le fait de vouloir traiter la combustion en prémélange et en diffusion dans le même problème implique l'introduction de deux nouvelles espèces avec leurs équations de transport respectives. Une espèce est le carburant prémélangé Y_{pF} et l'autre, l'oxydant prémélangé Y_{pO} (équations 2.73 et 2.74 respectivement).

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_{pF}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}_{pF}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Y}_{pF}}{\partial x_k} \right) + \bar{\omega}_{pF} \quad (2.73)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_{pO}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}_{pO}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Y}_{pO}}{\partial x_k} \right) + \bar{\omega}_{pO} \quad (2.74)$$

Par rapport à un modèle de flamme cohérente classique, quatre nouvelles équations doivent donc être résolues: Deux pour les deux nouvelles surfaces et deux autres pour le transport de l'oxydant et du carburant prémélangés.

La quantité totale de carburant est donc,

$$\tilde{Y}_F = \tilde{Y}_{p_F} + \tilde{Y}_{d_F} \quad (2.75)$$

et d'oxydant,

$$\tilde{Y}_O = \tilde{Y}_{p_O} + \tilde{Y}_{d_O} \quad (2.76)$$

où \tilde{Y}_{d_F} et \tilde{Y}_{d_O} sont respectivement les concentrations massiques moyennes de carburant et d'oxydant non mélangés (aussi calculées à partir d'équations du type 2.73 et 2.74).

Les équations de transport des espèces non prémélangées doivent tenir compte de leur disparition due à la combustion d'une part et au mécanisme de mélange d'autre part. Par ailleurs, l'équation de transport des espèces prémélangées contient un terme de disparition dû à la réaction chimique et un terme de production par le mélange. Ce dernier est symétrique du deuxième terme de disparition des espèces non prémélangées. Le terme source dû à la réaction chimique pour l'équation de transport de l'espèce j s'écrit donc, pour les espèces non prémélangées (en utilisant le formalisme du modèle de flamme cohérente de la section 2.4.2),

$$\tilde{\omega}_{d_j} = -\bar{\rho} \left(V_{c_j} \Sigma_c + V_{d_j} \Sigma_d \right) \quad (2.77)$$

et pour les espèces prémélangées,

$$\tilde{\omega}_{p_j} = \bar{\rho} \left(V_{c_j} \Sigma_c - V_{p_j} \Sigma_p \right) \quad (2.78)$$

2.5.2 Equations de transport des densités de surface

Les équations de transport des densités volumiques de surface s'écrivent:

- Densité de surface de flamme de diffusion,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma_d}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_k \Sigma_d}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_d} \frac{\partial \Sigma_d}{\partial x_k} \right) + \alpha_d \Lambda \Sigma_d + \\ &- 2 \alpha_d (\Lambda - \Lambda_{ed}) h (\Lambda - \Lambda_{ed}) \Sigma_d - \beta_d \left(\frac{V_{d_F}}{\tilde{X}_{d_F}} + \frac{V_{d_O}}{\tilde{X}_{d_O}} \right) \Sigma_d^2 + R_d \end{aligned} \quad (2.79)$$

- Densité de surface de flamme de prémélange,

$$\frac{\partial \Sigma_p}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_k \Sigma_p}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_p} \frac{\partial \Sigma_p}{\partial x_k} \right) + \alpha_p \Lambda f \left(\frac{l_t}{l_f}, \frac{\tilde{u}''}{S_l} \right) \Sigma_p - \beta_p \frac{S_l}{\tilde{X}_u} \Sigma_p^2 + R_{al} \quad (2.80)$$

- Densité de surface de contact,

$$\frac{\partial \Sigma_c}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_k \Sigma_c}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_c} \frac{\partial \Sigma_c}{\partial x_k} \right) + \alpha_c \Lambda \Sigma_c - \beta_c \left(\frac{V_{c_F}}{\tilde{X}_{d_F}} + \frac{V_{c_O}}{\tilde{X}_{d_O}} \right) \Sigma_c^2 + R_c \quad (2.81)$$

La section suivante présente l'interprétation des différents termes source modélisés des équations 2.79 à 2.81.

2.5.3 Modélisation des termes source des équations de transport de Σ

Surface de flamme de diffusion

Le premier terme $\alpha_d \Lambda \Sigma_d$ est le terme de production turbulente tel qu'il a été déduit par Marble et Broadwell. Il tient compte de la production de surface de flamme à travers l'étirement associé aux structures turbulentes.

Le premier terme source implique que quel que soit l'étirement, la flammelette s'adapte immédiatement à l'écoulement, donnant naissance à de nouvelles portions de surface de flamme selon un taux exponentiel. Or, le temps de réponse de la flammelette aux perturbations de l'écoulement, a une valeur finie. Dans les régions de l'écoulement où l'étirement est très fort et donc le temps turbulent très petit, la flammelette peut ne pas répondre immédiatement. Si la flammelette est étirée au-delà d'un étirement critique Λ_{ed} , elle peut s'éteindre. Le deuxième terme $2 \alpha_d (\Lambda - \Lambda_{ed}) h(\Lambda - \Lambda_{ed}) \Sigma_d$ tient compte de l'extinction, en contribuant à la diminution de la surface de flamme pour des valeurs de $\Lambda > \Lambda_{ed}$. La fonction de Heaviside $h(\Lambda - \Lambda_{ed})$ vaut 0 quand $\Lambda < \Lambda_{ed}$ et vaut 1 autrement. La détermination de l'étirement critique Λ_{ed} est cependant compliquée. Cette valeur dépend de la température à l'infini des réactifs (configuration de la flamme laminaire étirée avec l'écoulement des réactifs à contre-courant de la figure 2.13), des effets non stationnaires agissant sur la flamme et la courbure de celle-ci. La difficulté de l'évaluation de chacun de ces paramètres rend difficile le calcul de Λ_{ed} .

Le troisième terme $\beta_d \left(\frac{V_{dF}}{X_{dF}} + \frac{V_{dO}}{X_{dO}} \right) \Sigma_d^2$, décrit dans la section 2.4.3, correspond à la disparition de surface de flamme par consommation des réactifs. La valeur du taux de consommation de l'espèce j par unité de surface V_{dj} peut être obtenue à travers les calculs de flamme laminaire étirée de l'annexe A.

Le dernier terme R_d représente le couplage entre la flamme de diffusion et la flamme de prémélange. Il est utilisé pour initialiser la densité de surface de flamme de diffusion. Ce terme sera traité plus loin dans le texte.

Surface de flamme de prémélange

L'étirement dans le premier terme de droite de l'équation 2.80 est modélisé à partir de la fonction f issue du modèle ITNFS [52] dont les propriétés ont été discutées dans la section 2.4.2. La fonction f dépend de la vitesse de flamme laminaire S_l qui peut être évaluée par exemple à partir des formules empiriques de Metgalchi et Keck [79] 2 articles: propane et autres HC. disponibles pour plusieurs hydrocarbures. Aussi, des bibliothèques de flammelettes conçues à partir de calculs en chimie complexe de flammes laminaires pour des géométries simples peuvent être utilisées.

Le terme de disparition de densité de surface de flamme de prémélange $\beta_p \frac{S_l}{X_u} \Sigma_p^2$ est analogue à celui utilisé pour la densité de flamme de diffusion. Dans ce cas, X_u correspond à la fraction volumique de l'ensemble des espèces mélangées.

Le dernier terme source de cette équation R_{al} sert à coupler le modèle à trois surfaces au modèle d'auto-allumage. Ceci est fait à partir de l'initialisation de la flamme de prémélange, car l'auto-inflammation est un phénomène qui se déroule au sein des gaz prémélangés. Dillies [78] a utilisé un critère de continuité du taux de dégagement de chaleur pour faire le passage entre les deux modèles. Le champ initial de densité de surface de prémélange est calculé en fonction de l'énergie par unité de masse libérée pendant l'auto-allumage. Le taux de réaction de la combustion prémélangée reste ainsi continu à travers le passage entre les deux modèles. Cette formulation est physiquement acceptable. Cependant, le modèle IFP d'auto-allumage utilisé actuellement dans KIVA II [2] n'arrive pas à prédire correctement le dégagement de chaleur des réactions modélisées. L'objectif de ce type de modèles est plutôt de reproduire les délais d'auto-allumage.

Surface de contact

L'importance du mélange turbulent lors de l'auto-inflammation et de la combustion dans les moteurs Diesel a été signalée dans la section 2.2. La formation du mélange est traitée dans le modèle à trois surfaces par le concept de surface de contact. Dans une maille de calcul, il devient ainsi possible d'estimer combien de gaz sont en condition de brûler en prémélange et combien sont en condition de brûler en diffusion.

Le concept de surface de contact s'inspire du modèle de flamme cohérente. L'idée est d'avoir une surface non réactive qui, comme une surface de flamme, est étirée et convectée par l'écoulement turbulent. Cette surface ne sert pas à la destruction des réactifs mais à leur mélange. Elle existe tant qu'il existe du carburant et de l'oxydant non mélangés en contact l'un avec l'autre.

La surface de contact est considérée comme une surface d'iso-concentration de mélange. En conséquence, le rapport entre la vitesse de diffusion du carburant et la vitesse de diffusion de l'oxydant à travers cette surface est constante, ce qui implique que tous les gaz prémélangés sont à la même richesse. Comme la surface de contact s'identifie à une surface de flamme de diffusion non réactive, nous pouvons choisir par exemple le rapport stoechiométrique comme rapport entre les vitesses de diffusion. Nous identifions facilement dans cette approche l'application d'une hypothèse de flammelettes. La zone de mélange est très mince et localement a une structure laminaire. Etant donné le fort gradient de concentrations existant dans la zone de mélange, cette hypothèse est probablement justifiée. Aussi, si la richesse du mélange est en proportion stoechiométrique, une fois la flamme allumée, les gaz brûlent très rapidement. Ceci est raisonnable compte tenu de la haute température du mélange. Un calcul des V_{c_i} à partir des hypothèses de flammelettes, supposant que localement la zone de mélange peut s'identifier avec celle d'un écoulement laminaire étirée à contre-courant entre deux espèces, est présenté dans l'annexe A.4.

Les termes source dans l'équation de transport de la surface de contact sont identiques à ceux de l'équation de transport de la surface de flamme de diffusion. Les deux surfaces jouent le même rôle du point de vue de la diffusion des réactifs l'un vers l'autre. Les différences existent au niveau des constantes choisies, ainsi que dans le terme de couplage R_c .

Le terme R_c doit refléter le fait que l'apparition d'une certaine quantité de surface de flamme de diffusion limite la quantité de carburant et d'oxydant qui peuvent se mélanger, car ils sont pour la plupart, brûlés de façon très rapide. Ceci est traduit par une réduction de la

quantité de surface de contact. Il semble logique que le même effet qui fait naître la flamme de diffusion fasse à sa place disparaître la surface de contact. Le terme R_c est donc symétrique de son correspondant R_d . Comme la flamme de diffusion est initialisée à partir de la flamme de prémélange, ces termes sont considérés comme des fractions du terme de disparition de la densité de surface de prémélange,

$$R_d = -R_c = \gamma \frac{S_l}{\bar{X}_u} \Sigma_p^2 \quad (2.82)$$

où γ est une constante du modèle.

Les équations 2.79 à 2.81 sont résolues à chaque pas de temps en chaque maille. Il faut cependant remarquer que physiquement, les trois surfaces ne peuvent coexister au même instant et au même endroit. Ces équations fournissent les valeurs moyennes de chaque densité de surface. La coexistence est donc statistique et non physique.

2.5.4 Validité du modèle 3CFM

Le modèle 3CFM est fondé sur le fait que le mélange des espèces réactives peut être représenté par une surface et que la combustion (en prémélange et en diffusion) a lieu en régime de flammes. Ceci implique que les deux espèces se mélangent et brûlent en diffusion dans des régions très minces par rapport à la taille des structures turbulentes, autour de $\tilde{Z} = Z_{st}$. Ce même rapport d'échelles doit aussi être respecté par la flamme de prémélange. Cependant, le fait qu'une flamme brûle en régime de flammes n'implique pas que le modèle de flamme cohérente soit forcément adapté au problème.

Pour bien caractériser la structure d'une flamme mince, la combustion doit être traitée selon deux directions différentes: Une direction tangentielle qui représente le plan de la flamme et une direction normale qui caractérise la manière dont la flamme évolue par rapport à l'écoulement (figure 2.15). Il est donc clair que le modèle de flamme cohérente s'adapte bien aux systèmes où la structure normale au front de flamme est facile à modéliser car la surface de flamme ne sert qu'à décrire la composante tangentielle.

C'est le cas typiquement de la flamme de prémélange, où la vitesse de flamme laminaire et l'épaisseur de flamme laminaire décrivent la structure normale au front. Ces grandeurs sont en général déterminées à partir de mesures ou de calculs de flammes laminares avec chimie complexe pour des géométries simples. Il est important de noter que ce sont des grandeurs qui pour une même richesse du mélange ne varient pas le long du front de flamme. Dans le cas de la flamme de diffusion, la partie normale au front de flamme est caractérisée par la structure du mélange, fonction du gradient de la fraction de mélange. Or, cette dépendance en ∇Z oblige à la résolution permanente de la composante normale, car comme le montre la figure 2.15, ∇Z change le long du front de flamme. Cette variation est fonction de l'étirement subi par la flamme et donc de la turbulence.

Nous cherchons ici à étudier la validité du modèle 3CFM en fonction des faits présentés ci-dessus, à travers une analyse phénoménologique de la combustion et du mélange.

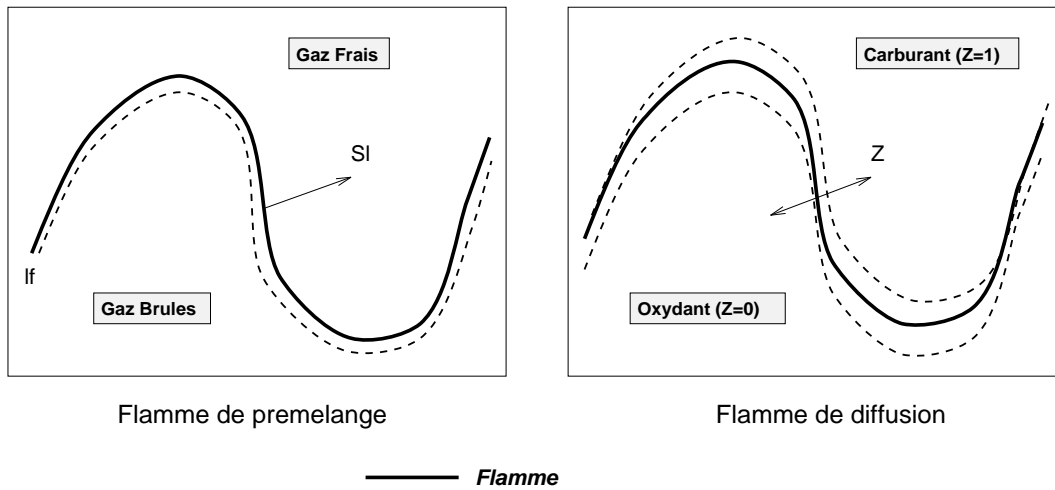


Figure 2.15 : Surface de flamme de prémélange et surface de flamme de diffusion. La surface de flamme de prémélange se propage par rapport à l'écoulement avec une vitesse S_l perpendiculaire au front de flamme. L'épaisseur du front de flamme l_f est petite par rapport aux échelles turbulentes. La flamme de diffusion n'a pas de vitesse caractéristique. Le taux de réaction local dépend du gradient de la fraction de mélange ∇Z .

Le mélange

Pour que la structure de mélange entre deux espèces puisse être ramenée à une surface, il faut que l'épaisseur locale de la zone de mélange soit faible devant son épaisseur moyenne. Les grandes échelles turbulentes contrôlent ainsi la dynamique du système en plissant le front de mélange. Les petites échelles peuvent interférer sur la structure interne du mélange, mais cette interaction doit rester faible devant le plissement. L'image de la figure 2.16 représente une partie d'une zone de mélange, où δ_Z est une dimension caractéristique de sa structure interne et Δ_Z est une estimation de son épaisseur moyenne.

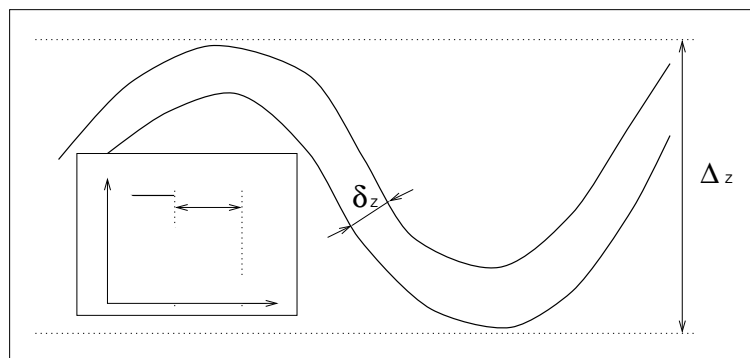


Figure 2.16 : Représentation schématique de la structure interne de la zone de mélange et de son profil moyen. La variable x est une coordonnée spatiale caractéristique du système.

Pour que l'hypothèse de flammelettes s'applique, il faut que le rapport δ_Z/Δ_Z soit faible. L'ordre de grandeur de δ_Z est supposé proportionnel à l'inverse de la moyenne du gradient de la fraction de mélange $|\overline{\nabla Z}|$,

$$\delta_Z \approx |\nabla \bar{Z}|^{-1} = \sqrt{\frac{2D}{\bar{\chi}}} \quad (2.83)$$

où $\bar{\chi}$ est la dissipation scalaire moyenne. De son côté, l'ordre de grandeur de Δ_Z est proportionnel à l'inverse du gradient de \bar{Z} ($\Delta_Z \approx |\nabla \bar{Z}|^{-1}$). En admettant que $\bar{\chi}$ soit calculée à partir de la formule 2.32, nous obtenons,

$$\frac{\delta_Z}{\Delta_Z} \approx |\nabla \bar{Z}| / \left(\frac{Z'}{l_t} \sqrt{\frac{C_D k^{\frac{1}{2}} l_t}{2D}} \right) \quad (2.84)$$

avec l'échelle intégrale $l_t = k^{3/2}/\epsilon$. La valeur rms ("root mean square") de la fraction de mélange Z' est d'ordre 1 lors de la formation du mélange et la constante C_D vaut en général 2. Nous supposons aussi que $|\nabla \bar{Z}|^{-1}$ est de l'ordre de l'échelle intégrale l_t . Nous obtenons finalement,

$$\frac{\delta_Z}{\Delta_Z} \approx Re_t^{-\frac{1}{2}} \quad (2.85)$$

avec le nombre de Reynolds turbulent $Re_t = k^{1/2} l_t / \nu$ et $\nu \approx D$.

Pour un système où Re_t est élevé, l'approche de flammelettes est valable. C'est le cas en général des moteurs à combustion interne. Dans la section 4.3.4, nous allons voir que dans un système où $Re_t = 100$, l'hypothèse fondamentale du modèle de mélange par surface de contact est en effet respectée,

$$\bar{\omega}_{p_i} = V_{c_i} \Sigma_c \quad (2.86)$$

avec V_{c_i} constante sur toute l'épaisseur de la zone de mélange. La variable $\bar{\omega}_{p_i}$ ne représente pas un taux de réaction mais le taux de mélange (masse mélangée par unité de volume et par unité de temps) de l'espèce i .

Le concept de surface de mélange semble donc bien adapté au calcul du mélange turbulent dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel. Cependant, nous savons déjà que la modélisation des différents termes de l'équation de transport de Σ_c reste intuitive et mérite des études plus approfondies. Autrement, comme le mélange turbulent est contrôlé essentiellement par la dissipation scalaire, il semble plus raisonnable de travailler directement avec cette grandeur qu'avec une surface de contact difficile à modéliser. Dans ce cas, la résolution de l'équation de transport de Σ_c serait remplacée par une équation de transport de $\bar{\chi}$. De plus, χ nous permet de nous affranchir du problème de la détermination des vitesses de diffusion des espèces à travers la surface de contact V_{c_i} . En effet la dissipation scalaire est définie à partir du gradient de la fraction de mélange et contient donc intrinsèquement de l'information sur la structure normale à la surface de mélange. Nous allons voir dans la section 4.3.4 que la densité de surface de contact a en effet un rapport direct avec la dissipation scalaire.

La flamme de diffusion

Les visualisations de flammes à l'intérieur de la chambre de combustion des moteurs Diesel (e.g. Heywood [80]) ont pendant longtemps donné l'impression qu'il s'agissait d'une combustion

volumique. En effet, l'observation directe de la chambre ne permet d'extraire que la combustion des suies, fortement rayonnante ayant lieu dans des régions où le carburant se trouve en excès par rapport à l'oxydant. Dec [81] a montré, à partir d'observations plus fines des zones de combustion, que l'endroit de plus fort dégagement de chaleur est bien représenté par une surface plissée par la turbulence, placée autour du combustible gazeux.

L'analyse et l'étude de flammes de diffusion turbulentes à l'aide de la simulation numérique directe de Van Kalmthout [68] est l'exemple d'un cas où le concept la surface de flamme de diffusion trace de manière fidèle la zone de réaction. Dans les configurations étudiées et lorsque la flamme de diffusion est bien établie, la proportionnalité entre le taux de réaction et la densité de surface de flamme de diffusion est aussi vérifiée,

$$\bar{\omega}_i = V_{d_i} \Sigma_d \quad (2.87)$$

avec les V_{d_i} constantes à l'intérieur de la zone de mélange. Cependant comme pour l'équation de transport de la densité de surface de contact, la modélisation de certains des termes source de l'équation de transport de la densité de surface de flamme de diffusion reste à développer et à valider. De la même façon, les vitesses de diffusion des différentes espèces V_{d_i} dépendent de la structure du mélange et leur détermination n'est donc pas simple.

L'application du modèle de flamme cohérente aux flammes de diffusion demande une meilleure maîtrise de l'équation de transport de sa densité de surface, ainsi que la modélisation des V_{d_i} en fonction de l'étirement auquel la flamme est soumise.

La flamme de prémélange

Il n'est pas clair que dans un moteur Diesel, la flamme de prémélange issue des différents points d'auto-allumage puisse être calculée à partir du modèle de flamme cohérente. Il s'agit d'une flamme de transition entre l'auto-inflammation et la flamme de diffusion établie. Elle se propage à grande vitesse dans toutes les directions où il existe du mélange inflammable. Dans la direction perpendiculaire aux iso-lignes de fraction de mélange, cette flamme relie les différents points d'auto-allumage. Cependant, elle peut aussi se propager dans la direction parallèle à ces iso-lignes vers des zones très pauvres et très riches où elle finit par s'éteindre (mécanisme d'établissement des flammes triples étudié et documenté par Domingo *et al.*[82] symposium et références dedans). ou Mastorakos *et al.* [3]).

Nous avons vu, lors de la discussion des mécanismes de formation du mélange au sein de l'écoulement turbulent, que la structure interne du mélange est fine devant les grandes échelles turbulentes. Il semble donc peu probable que la dynamique de la flamme de prémélange, qui se développe à l'intérieur de cette zone, puisse être directement fonction de la turbulence comme le suppose le modèle de flamme cohérente. La turbulence participe activement à la formation du mélange, mais probablement pas à la propagation des flammes issues de l'auto-inflammation (figure 2.17). La validité du modèle à surface de mélange dans la description du mélange turbulent empêche ainsi d'une certaine façon son application aux flammes de prémélange issues des points d'auto-inflammation.

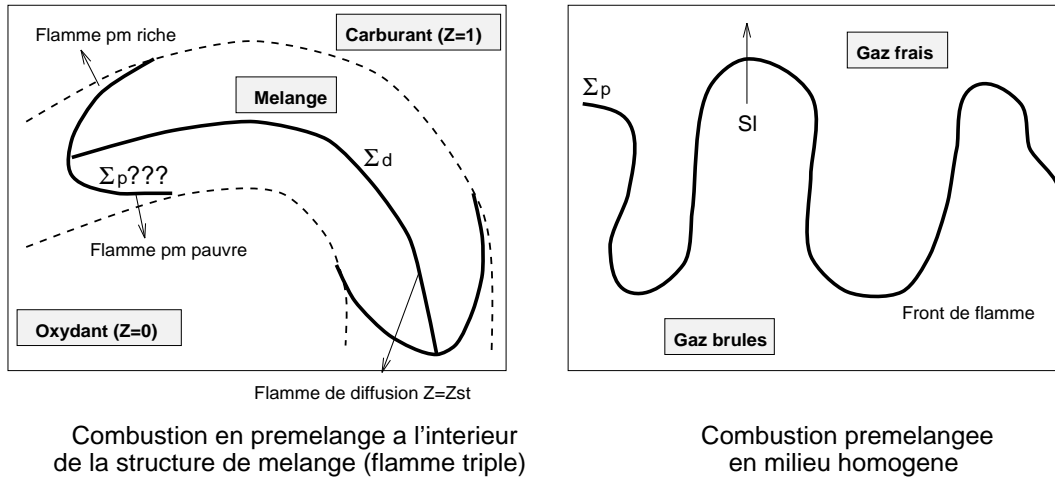


Figure 2.17 : Flamme de prémélange se propageant à l'intérieur d'une zone de mélange après l'auto-inflammation et flamme de prémélange se propageant dans un milieu turbulent à richesse constante. L'influence de la turbulence ne se fait probablement pas sentir pendant la propagation de la flamme à l'intérieur de la zone de mélange de faible épaisseur.

2.5.5 Conclusion

Le modèle 3CFM présente donc un handicap important au niveau de la description de la transition entre l'auto-inflammation et la flamme de diffusion établie. La description du mélange turbulent est elle aussi compliquée, même si le concept de surface de contact semble bien adapté aux caractéristiques des systèmes étudiés. Son application exige la résolution d'équations de transport de la surface de contact et des concentrations des espèces mélangées. De plus, des vitesses de consommation des différentes espèces à travers la surface de contact doivent être déterminées. Autrement, la surface de contact et la dissipation scalaire semblent avoir un rapport entre elles. Or, la dissipation scalaire, au contraire de la densité de surface de contact, apparaît naturellement dans l'équation de mélange (équation 2.29). La logique suggère alors que la résolution des problèmes de mélange turbulent à l'aide de la dissipation scalaire soit plus précise. Enfin, la liaison entre le mécanisme d'auto-inflammation et le modèle 3CFM dépend intrinsèquement du taux de réaction issu du premier. Or, les mécanismes cinétiques d'auto-allumage communément employés cherchent plutôt à bien modéliser les délais d'allumage, ce qui n'est pas une garantie que les taux de réaction calculés soient exacts.

L'annexe B présente un calcul complet de combustion avec le modèle 3CFM dans des conditions proches de celles rencontrées dans la chambre d'un moteur Diesel. Des tests de sensibilité du modèle par rapport à plusieurs paramètres sont effectués. Il est ainsi possible de mieux comprendre son fonctionnement.

2.6 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre les problèmes caractéristiques de chacune des phases de la combustion dans les moteurs Diesel. Traditionnellement, à chaque étape correspond un type spécifique de modèles qui tient compte des aspects physiques des phénomènes à modéliser. Nous avons regardé quelques uns de ces modèles et aussi, la manière de faire la liaison entre eux.

L'allumage est en général traité à l'aide de schémas cinétiques réduits. Nous avons illustré ce type d'approche en effectuant des tests aux caractéristiques du fonctionnement du modèle à 4 étapes de l'IFP (conçu pour l'allumage du n-heptane). Ces modèles ont l'inconvénient de traiter le mélange entre le carburant injecté et l'oxydant comme un phénomène purement laminaire (si les valeurs moyennes des concentrations de carburant et d'oxydant dans une maille de calcul sont non nulles, alors les deux espèces sont parfaitement mélangées). La simulation numérique directe nous a aidé à comprendre que ce n'est pas toujours le cas. Les modèles cinétiques, même s'ils sont corrects du point de vu chimique, ne prennent pas en compte la nature très turbulente des écoulements dans les moteurs.

Une fois que la flamme est allumée et que l'augmentation de la température est importante, les modèles d'auto-inflammation sont couplés à des modèles de combustion à haute température. Leur principale caractéristique est le changement d'échelle du problème. Ces modèles considèrent que la turbulence est le facteur principal de développement de la flamme. Avec des modèles du type flammelettes, des effets chimiques peuvent aussi être pris en compte.

La grande difficulté de cette méthode est la liaison entre les deux mécanismes de nature distincte: L'allumage et la combustion à haute température. Dans la section 2.5, le modèle 3CFM a été présenté. Ce modèle, lié à un mécanisme d'auto-inflammation, permet la simulation de tous les phénomènes physiques importants ayant lieu dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel et aussi de leurs transitions. Cependant, nous avons vu que le modèle 3CFM pose des problèmes, autant au niveau de l'interprétation de certains phénomènes physiques ayant lieu, qu'au niveau de la modélisation de termes des équations de transport de surface.

Le chapitre suivant est dédié à la recherche et à l'analyse d'un modèle complet de combustion dans les moteurs Diesel. Nous prétendons ainsi combler certaines des difficultés importantes présentées dans ce chapitre: L'intégration des effets turbulents sur le mécanisme d'auto-inflammation et la transition entre l'auto-inflammation et la combustion complètement développée, en passant par une phase transitoire de combustion en prémélange.

Chapitre 3

Modélisation du taux de réaction

3.1 Introduction

Nous avons vu dans le chapitre précédent qu'une des principales difficultés de la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel est l'impossibilité de traiter la combustion comme un phénomène global. A cause des échelles caractéristiques très différentes des phénomènes à modéliser, la conception d'un modèle unique est difficile. Ces différentes échelles correspondent à des phases distinctes du processus de combustion Diesel:

- La phase de mélange des réactifs suivie de leur auto-inflammation.
- Le développement d'une flamme de prémélange issue des divers points d'auto-allumage, qui se propage au restant du mélange réactif créé.
- L'établissement d'une flamme de diffusion qui sépare les deux écoulements non réactifs de carburant et d'oxydant.

Les modèles décrits dans le chapitre 2 montrent que la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel se heurte en général à deux types de problèmes:

- Le traitement du mélange pendant la période d'auto-allumage.
- Le couplage entre les différents modèles utilisés pour chaque phase de la combustion.

Les différentes approches à la modélisation de la combustion Diesel sont décrites dans le tableau de la figure 3.1. Pour chacune de ces approches, les différents sous-modèles utilisés dans chaque phase sont présentés. Les paramètres responsables de la communication entre les sous-modèles sont signalés. Chaque approche contient un certain nombre d'équations de transport additionnelles qu'il faut résoudre par rapport au nombre d'équations de base d'un code RANS ("Reynolds Averaged Navier Stokes"). La dernière ligne du tableau correspond au modèle PDFA/CHI qui est proposé dans la deuxième partie de ce chapitre. Ce modèle essaie de résoudre les deux problèmes de la modélisation de la combustion Diesel mentionnés ci-dessus.

La première partie de ce chapitre est dédiée à l'étude et à la compréhension du mélange turbulent. Dans le chapitre précédent, nous avons signalé son importance lors de l'auto-inflammation et de la combustion en diffusion. Pendant la phase d'auto-inflammation, les réactions chimiques ne peuvent avoir lieu que si les réactifs sont mélangés. Le mélange turbulent contrôle aussi le taux de réaction associé à la flamme de diffusion qui sépare l'oxydant du

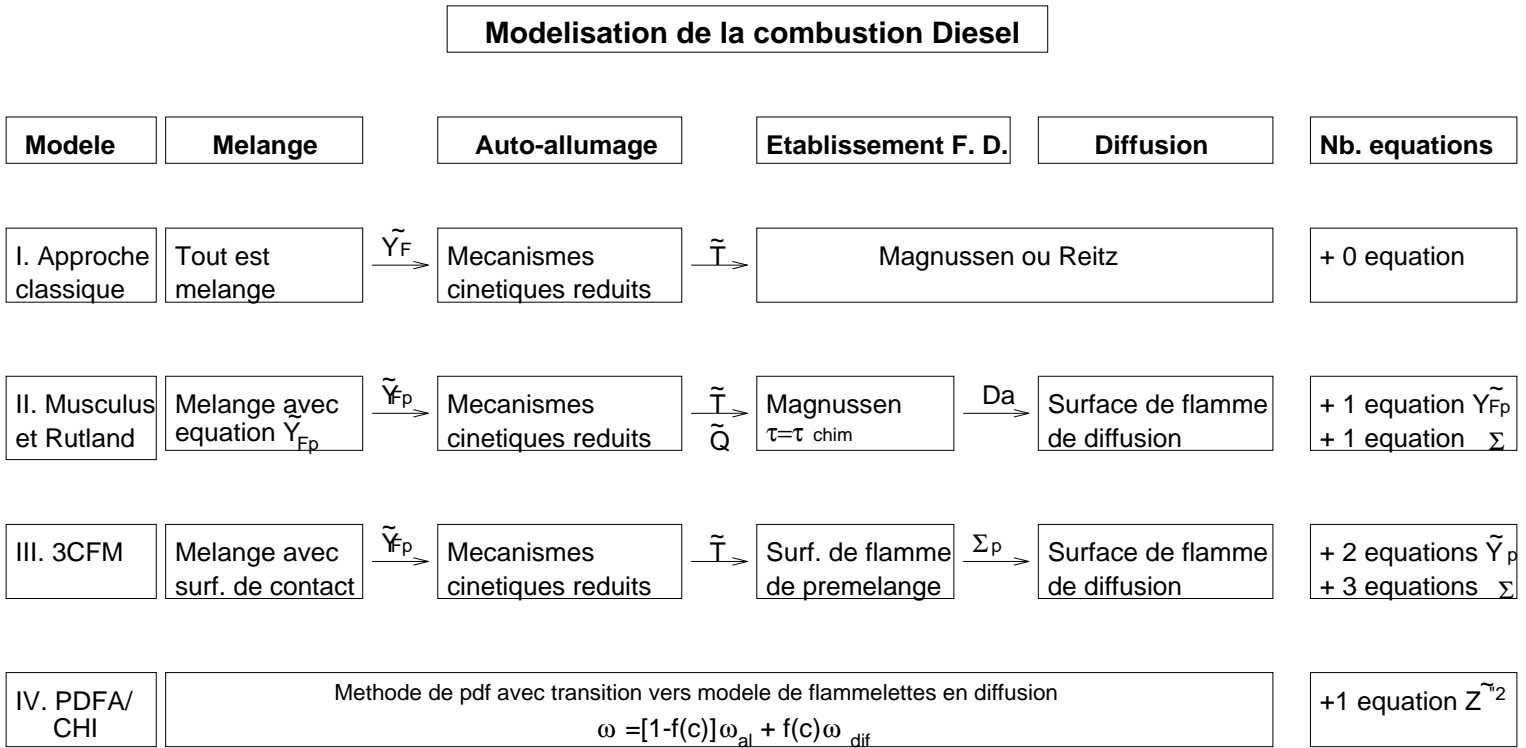


Figure 3.1 : Les trois approches différentes à la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel présentées dans le chapitre 2, ainsi que la formulation du modèle PDF/A/CHI proposé dans ce chapitre.

carburant. C'est le taux auquel ils se rencontrent qui détermine l'intensité de la réaction chimique. Dans le modèle 3CFM, le mélange turbulent a été pris en compte à l'aide d'une surface de mélange (surface de contact). Dans la section suivante, la définition d'espèce mélangée est abordée, ainsi que d'autres approches possibles pour sa modélisation en vue de son introduction dans des modèles de combustion Diesel.

Dans la deuxième partie du chapitre, un modèle complet de combustion Diesel est proposé (modèle PDFA/CHI). Ce modèle tient compte du mélange turbulent lors des phases d'auto-inflammation et d'établissement de la flamme de diffusion. Pour cela, une approche à *pdf* présumées est utilisée. Lorsque une flamme de diffusion s'établit et que la chimie s'approche de l'équilibre, le modèle transite vers une formulation algébrique du type flammellettes décrite dans la section 2.4.3.

3.2 Mélange turbulent non réactif

Au sein d'un écoulement laminaire, le seul mécanisme de mélange entre les différentes espèces est la diffusion de masse due à leur viscosité caractéristique. Lors de la modélisation de ce type d'écoulement, si dans une maille de calcul des espèces différentes se retrouvent, alors il est certain que ces espèces sont présentes au même instant et au même endroit. Elles sont donc mélangées dans le sens où elles peuvent réagir chimiquement.

Dans le cadre d'une modélisation de premier ordre¹ d'un écoulement turbulent, nous ne disposons à chaque pas de temps que des valeurs moyennes des grandeurs calculées. Rien ne nous est donc dit concernant l'état instantané de l'écoulement. Le fait d'avoir dans la même maille des concentrations moyennes de deux espèces différentes de zéro n'implique donc pas qu'à un instant donné elles soient mélangées (figure 3.2). Si l'intensité des fluctuations turbulentes de concentration est assez forte, le mélange peut même ne pas exister dans la maille. Aussi, l'information sur les moyennes ne dit rien sur la manière dont les espèces sont distribuées dans la maille (leurs gradients ne sont pas connus à l'échelle de la maille). Davantage d'information est donc nécessaire. L'objectif de cette section est la compréhension des mécanismes de mélange turbulent et de la manière dont ils peuvent être modélisés.

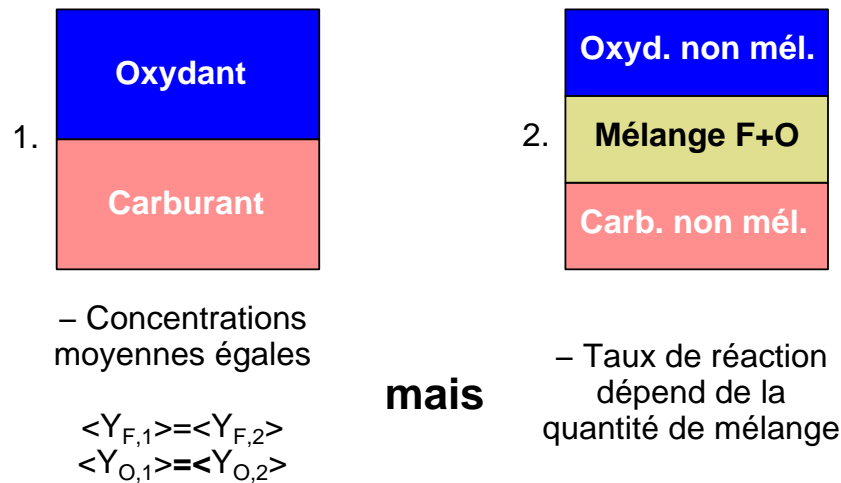


Figure 3.2 : Distribution des réactifs dans une maille de calcul. La concentration moyenne ne suffit pas à la description de la structure et de la quantité de mélange.

3.2.1 Grandeurs étudiées et procédure

La moyenne du produit des concentrations des réactifs F et O permet l'évaluation du mélange turbulent dans le domaine de calcul. Une équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$ est écrite et modélisée. La valeur de $\overline{Y_F Y_O}$ indique en moyenne, où F et O sont présents au même endroit et au même instant. Une valeur locale faible de $\overline{Y_F Y_O}$ par rapport à sa valeur maximale indique qu'à cet endroit il existe bien du carburant et de l'oxydant qui sont mélangés mais que la concentration d'au moins un des réactifs est faible.

¹Modélisation de premier ordre signifie que seules les valeurs moyennes des différentes variables de l'écoulement sont calculées.

L'équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$ dans un écoulement turbulent non réactif, à densité constante s'écrit,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \overline{Y_F Y_O} + \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{u}_k \overline{Y_F Y_O} + \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_k (Y_F Y_O)'} = \\ \frac{\partial}{\partial x_k} \left(D \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{Y_F Y_O} \right) - 2D \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{Y}_O}{\partial x_k} - 2D \frac{\partial Y'_F}{\partial x_k} \frac{\partial Y'_O}{\partial x_k} \end{aligned} \quad (3.1)$$

L'utilisation de cette équation pour des calculs de mélange dans un code moyenné implique la modélisation des deux termes inconnus $\overline{u'_k (Y_F Y_O)'}$ et $2D \frac{\partial Y'_F}{\partial x_k} \frac{\partial Y'_O}{\partial x_k}$ qui représentent respectivement des corrélations de deuxième ordre entre les fluctuations de la vitesse et des concentrations des réactifs et entre les fluctuations de concentration des réactifs. Le troisième terme du côté gauche de l'équation est modélisé à partir d'une approche classique du type gradient, à l'aide d'un coefficient de diffusion turbulente,

$$\overline{u'_k (Y_F Y_O)'} = D_t \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{Y_F Y_O} \quad (3.2)$$

L'ensemble des deux derniers termes du côté droit de l'équation représente la dissipation scalaire moyenne $\bar{\chi}$. La partie qui correspond aux gradients des fluctuations de concentration est aussi inconnue et doit être modélisée. Sachant que dans un écoulement non réactif, les concentrations des espèces réactives Y_F et Y_O sont proportionnelles à la valeur de la fraction de mélange Z définie par l'équation 2.19, ($Y_F = Y_{F,0} Z$ et $Y_O = Y_{O,0} (1 - Z)$), nous avons,

$$2D \left(\frac{\partial Y'_F}{\partial x_k} \frac{\partial Y'_O}{\partial x_k} \right) = -2D \left(\frac{\partial Z'}{\partial x_k} \frac{\partial Z'}{\partial x_k} \right) \quad (3.3)$$

Le terme de droite de l'équation 3.3 est la partie fluctuante de la dissipation scalaire définie dans l'équation 2.32. Nous avons vu que ce terme est en général modélisé en supposant que la dissipation de la grandeur scalaire étudiée est proportionnelle à la dissipation de l'énergie cinétique turbulente:

$$\frac{\chi / \overline{Y'_F Y'_O}}{\epsilon / k} = C_D \quad (3.4)$$

où $\overline{Y'_F Y'_O} = \overline{Y_F Y_O} - \bar{Y}_F \bar{Y}_O$. Il s'agit du même type d'approche que celle utilisée dans la modélisation de la partie fluctuante de la dissipation des scalaires conservés (équation 2.32).

3.2.2 Modèles pour le calcul de la fraction des espèces prémélangées

Le calcul des fractions de carburant et d'oxydant effectivement mélangées fait l'objet du travail de modélisation du mélange turbulent. Pour le faire, il faut:

- Définir ce que sont les fractions de carburant et d'oxydant effectivement mélangées.
- Concevoir un modèle, capable à partir de \bar{Y}_F , \bar{Y}_O et de $\overline{Y_F Y_O}$, de fournir les fractions mélangées de carburant \bar{Y}_{p_F} et d'oxydant \bar{Y}_{p_O} .

Définition d'une variable caractérisant le prémélange: \bar{Y}_{p_i}

Pour déterminer quelles sont les quantités de carburant et d'oxydant qui sont effectivement mélangées, nous allons considérer que le carburant et l'oxydant sont mélangés lorsque les deux espèces existent en moyenne, au même endroit et au même instant et que leur rapport est compris dans des bornes de richesse prédéfinies. La richesse ϕ est définie par,

$$\phi = r \frac{Y_F}{Y_O} \quad (3.5)$$

où r est le rapport massique stoechiométrique entre l'oxydant et le carburant.

Il est plus courant et plus pratique dans les études de mélange turbulent d'utiliser la fraction de mélange Z à la place de la richesse [83]. La fraction de mélange Z est définie algébriquement en fonction des concentrations de carburant et d'oxydant. Pour un écoulement non réactif, où $Y_F = Y_{F,0}Z$ et $Y_O = Y_{O,0}(1 - Z)$,

$$\phi = r \frac{Y_{F,0}}{Y_{O,0}} \frac{Z}{1 - Z} \quad (3.6)$$

La concentration moyenne d'une espèce prémélangée présente sur un point $[x_0, y_0]$ est alors calculée comme la moyenne sur un ensemble de N réalisations des concentrations instantanées de cette espèce, conditionnée par le fait que la fraction de mélange instantanée soit comprise dans les bornes d'inflammabilité Z_1 et Z_2 ,

$$\bar{Y}_{p_i}(x_0, y_0) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N Y_i(x_0, y_0 | Z_1 < Z < Z_2) \quad (3.7)$$

Modélisation de la variable de prémélange: \bar{Y}_{p_i}

Nous proposons ici deux modèles algébriques pour calculer la concentration de carburant ($i = F$) prémélangé. Le premier part de l'hypothèse que la concentration moyenne de carburant prémélangé est proportionnelle à la concentration moyenne locale de carburant. Cette proportionnalité est décrite par un coefficient de mélange C_{mel} défini par $\overline{Y_F Y_O}$ normalisé par sa valeur maximale locale (sur le point de calcul) possible, le produit $[\bar{Y}_F \bar{Y}_O]$,

$$C_{mel} = \frac{\overline{Y_F Y_O}}{\bar{Y}_F \bar{Y}_O} \quad (3.8)$$

$$\bar{Y}_{p_F} = C_{mel} \bar{Y}_F \quad (3.9)$$

Veynante [84] a proposé un deuxième modèle pour la détermination de la concentration des espèces prémélangées. En considérant que le mélange une fois formé est homogène, il est possible d'écrire que,

$$\bar{Y}_{p_F} \bar{Y}_{p_O} = \overline{Y_F Y_O} \quad (3.10)$$

En supposant que la richesse du prémélange est égale à la richesse calculée à l'aide des concentrations moyennes ($\bar{Y}_{p_F} / \bar{Y}_{p_O} = \bar{Y}_F / \bar{Y}_O$), une expression pour \bar{Y}_{p_F} est obtenue en fonction de \bar{Y}_F et de $\overline{Y_F Y_O}$,

$$\bar{Y}_{p_F} = \sqrt{\frac{\bar{Y}_F}{\bar{Y}_O} \overline{Y_F Y_O}} \quad (3.11)$$

ce qui est équivalent à dire que $\bar{Y}_{p_F} = \bar{Y}_F \sqrt{C_{mel}}$. Les deux modèles sont donc fondés sur le même concept.

Il est important de noter que dans un problème de combustion, seul le domaine de fraction de mélange (richesse) où le mélange est inflammable est significatif. Une information additionnelle sur la fraction de mélange doit donc être apportée à la définition de C_{mel} . Son application aux calculs du prémélange ne sera effectuée que sur le domaine de fraction de mélange inflammable. Ce domaine dépend du carburant utilisé.

3.2.3 Détermination des *pdf* de mélange

Jusqu'ici, nous n'avons étudié que le champ de mélange moyen $\overline{Y_F Y_O}$ à l'aide duquel nous avons essayé de déterminer algébriquement les fractions de réactifs mélangés. Pour cela, nous avons écrit une équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$ et nous avons étudié la fermeture des termes de corrélation d'ordre supérieure à 1 qui apparaissent dans cette équation. Ceci a aidé à la compréhension du concept de mélange turbulent ainsi que de son importance. Les modèles algébriques proposés pour calculer \bar{Y}_{p_F} ont mis en évidence la différence entre le mélange moyen $\overline{Y_F Y_O}$ et le mélange calculé à partir des concentrations moyennes de réactifs \bar{Y}_F et \bar{Y}_O . Il existe cependant un moyen de calculer la concentration d'une espèce mélangée en s'affranchissant de l'utilisation de modèles algébriques. Les Y_{p_i} peuvent être calculées directement à partir de leur définition (équation 3.7), dans le cas où la distribution de probabilité de la fraction de mélange est connue,

$$Y_{p_i} = \overline{Y_i (Z_1 < Z < Z_2)} = \int_{Z_1}^{Z_2} Y_i(Z) P(Z) dZ \quad (3.12)$$

où $P(Z)$ est la fonction densité de probabilité associée à la fraction de mélange Z . La distribution de probabilité de Z , ensemble avec les informations déjà connues sur les champs moyens, implique la connaissance complète de la structure du mélange à chaque point de l'écoulement.

Si les *pdf* de la fraction de mélange peuvent être calculées en fonction de grandeurs connues, obtenues lors des calculs moyens (méthode des *pdf* présumées présentée dans la section 2.3.4), alors les fractions des espèces prémélangées peuvent aussi être déterminées.

Il est aussi intéressant de noter que dans un problème avec réaction chimique, pendant l'auto-inflammation (faible variation de la température et faible consommation des réactifs), le taux de réaction ne dépend que des fractions massiques de carburant et d'oxydant. Il peut donc être déterminé en fonction de la fraction de mélange et de sa fonction densité de probabilité,

$$\bar{\omega} = \int_0^1 \omega(Z, T = Cte) P(Z) dZ \quad (3.13)$$

L'application de la méthode à *pdf* présumées décrite dans la section 2.3.4 demande la connaissance des deux premiers moments de la variable aléatoire utilisée: La moyenne et la variance de la fraction de mélange. La moyenne de la fraction de mélange est obtenue algébriquement à partir des concentrations moyennes des espèces réactives (équation 2.19). Dans la section 2.3.4 nous avons présenté l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange, ainsi que la manière dont ses termes source sont modélisés. L'étude effectuée en début de cette section concernant la fermeture de l'équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$ est extensible à l'équation de transport de $\overline{Z'^2}$. Les deux équations ont la même nature. Comme suggéré dans la section 2.3.4, \overline{Z} et $\overline{Z'^2}$ permettent la détermination des différents paramètres d'une *pdf* présumée de Z , qui en général est une fonction β (équations 2.34, 2.35 et 2.36).

3.2.4 Conclusion

L'importance de la quantification du mélange entre les espèces réactives au sein d'un écoulement turbulent a été mise en évidence. Les approches classiques à la modélisation de la combustion Diesel considèrent que dès que les concentrations moyennes des réactifs dans une maille de calcul sont non nulles, alors ces réactifs sont complètement mélangés et peuvent réagir entre eux (comme s'il s'agissait d'un écoulement laminaire). Nous avons montré que dans un écoulement turbulent, il faut prendre en compte les fluctuations des concentrations pour pouvoir déterminer les quantités effectivement mélangées. Le prémélange a donc été défini et des modèles algébriques ont été proposés pour calculer les concentrations de réactifs qui peuvent réagir. L'étude a abouti sur une méthode à *pdf* présumées de la fraction de mélange, où les quantités mélangées sont calculées de façon naturelle. Quelle que soit la méthode utilisée pour le calcul du mélange turbulent, une équation de transport additionnelle doit être résolue. En effet, le champ moyen des différentes variables ne suffit pas à la description du mélange turbulent. Celui-ci est intrinsèquement lié au champ turbulent et donc, des informations sur la partie aléatoire de ce champ doivent être utilisées.

La section suivante traite le cas du mélange turbulent réactif. Un modèle de combustion qui tient compte des quantités mélangées est proposé. La validation et le test des méthodes proposés (pour les modèles non réactifs et réactifs) sont effectués dans le chapitre 4.

3.3 Mélange turbulent avec combustion: Modélisation

3.3.1 Introduction

Nous avons vu que le mélange turbulent peut être décrit à partir de fonctions densité de probabilité de la fraction de mélange. Ces fonctions peuvent être présumées à partir des variables caractéristiques de l'écoulement moyen plus la variance de la fraction de mélange. Nous cherchons dans cette section à formuler un modèle de combustion qui tienne compte des caractéristiques du mélange pendant les processus d'allumage et d'établissement d'une flamme de diffusion. Pour cela, nous proposons un modèle d'auto-inflammation à *pdf* présumées qui intègre les effets de la réaction chimique (consommation des espèces et dégagement de chaleur) et les effets du mélange turbulent.

L'équation de transport de la fraction massique moyenne d'une espèce i (\tilde{Y}_i) dans un écoulement réactif à densité variable est,

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}_i}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k} \right) - \bar{\omega}_i \quad (3.14)$$

où D_t est un coefficient de diffusion turbulente calculée à l'aide des paramètres turbulents, par exemple du modèle $k - \epsilon$ et $\tilde{\omega}_i$, le taux de réaction instantané par unité de masse, est calculé par une formule d'Arrhenius d'ordre 1 par rapport aux espèces réactives i et j :

$$\tilde{\omega}_i = \rho A Y_i Y_j \exp(-T_a/T) \quad (3.15)$$

Le paramètre A est un facteur pré-exponentiel de dimensions s^{-1} et T_a est la température d'activation de la réaction chimique.

3.3.2 Formulation du modèle PDFFA

Nous présentons ici un modèle appelé PDFFA fondé sur une approche *pdf* présumées, couplée à une méthode asymptotique pour prévoir la structure des zones de réaction diffusives [20, 60].

Le taux de réaction moyen pendant la phase d'auto-inflammation est modélisé à l'aide d'une fonction de densité de probabilité qui permet d'inclure dans le calcul du taux de réaction moyen les effets aléatoires caractéristiques des champs turbulents. L'expression exacte du taux de consommation moyen d'une espèce i est

$$\bar{\omega}_i = \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\omega}_i(X) P(X) dX \quad (3.16)$$

où X est le vecteur contenant toutes les variables de l'écoulement dont le domaine peut varier entre $-\infty$ et $+\infty$ et $P(X)$ est la fonction densité de probabilité jointe de l'ensemble des variables X .

Parmi les variables qui composent le vecteur X , celle qui représente l'état du mélange entre deux espèces F et O à un instant et une position donnés est la fraction de mélange Z (équation 2.19). La fraction de mélange ainsi définie varie entre 0 et 1 et est un traceur de la quantité de carburant présente dans le système. Elle équivaut à la concentration massique

de F normalisée par la valeur $Y_{F,0}$ si l'écoulement est non réactif. La fraction de mélange apparaît naturellement dans un problème de mélange ou de combustion à travers une flamme de diffusion où, comme situation limite, les deux espèces réactives sont parfaitement séparées l'une de l'autre.

Pendant l'auto-inflammation, le modèle proposé ici suppose que $\dot{\omega}_i$ peut être exprimée en fonction de la fraction de mélange Z et d'une variable d'avancement de la réaction (à définir) c , telle que,

$$\bar{\omega}_i = \int_0^1 \dot{\omega}_i(Z, c) P(Z, c) dZ dc \quad (3.17)$$

Le fait d'exprimer le problème de l'auto-inflammation en fonction de deux variables, Z et c , est caractéristique de la résolution de problèmes d'allumage et de stabilisation de flammes de diffusion [16]. La variable Z sert à définir l'état du mélange entre les réactifs, tandis que c indique quelle fraction des réactifs mélangés a déjà brûlé. Pour les deux situations limites de la flamme de prémélange en milieu homogène et flamme de diffusion pure à chimie infiniment rapide, une seule variable suffirait à décrire le système. Dans le premier cas, Z serait une constante, tandis que dans la deuxième situation, c n'aurait pas de signification. Les modèles d'auto-inflammation à deux variables fondés sur le concept des *pdf* présumées ne sont donc pas nouveaux (*cf.* le modèle de Zhang *et al.* [15] présenté dans la section 2.2.4). Janicka et Kollmann [85] ont utilisé ce même formalisme à deux variables pour la modélisation d'une flamme de diffusion H_2 -Air. Les différences entre ces modèles sont dues à la façon dont les variables de l'écoulement sont exprimées en fonction de Z et de c , ainsi qu'à leur relation avec les *pdf*.

Détermination de la variable d'avancement c

Nous sommes amenés à construire une variable d'avancement qui tienne compte de l'évolution de la réaction chimique en fonction du mélange. Pendant la phase de mélange avant l'auto-inflammation, si les réactions chimiques sont caractérisées par une forte énergie d'activation, la consommation des réactifs, ainsi que l'évolution de la température sont négligeables. La variable d'avancement à définir doit alors être proche de zéro. Au contraire, quand la flamme de diffusion est établie et le régime de combustion atteint l'équilibre chimique, la variable d'avancement approche de 1. Elle indique donc, pour une fraction de mélange fixée, quelle fraction des réactifs mélangés avant l'auto-inflammation a été consommée entre cette phase et l'établissement de la flamme de diffusion. Nous devons pouvoir construire la variable d'avancement à partir des différentes courbes d'évolution des réactifs ou de la température dans l'espace Z . Dans un premier temps, à titre d'exemple, nous concevons c à partir des trois variables suivantes représentées sur la figure 3.3:

- La quantité effective de carburant qui est présente dans le domaine de calcul (Y_F).
- Sa valeur si l'écoulement était non réactif ($Y_{F,mel}$):

$$Y_{F,mel} = Y_{F,0} Z \quad (3.18)$$

- Sa valeur lors d'une réaction chimique en équilibre ($Y_{F,eq}$). Si nous considérons que la flamme à l'équilibre est infiniment mince (flamme de Burke-Schumann),

$$Y_{F,eq} = \begin{cases} 0 & \text{si } Z \leq Z_{st} \\ Y_{F,0} \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}} & \text{si } Z > Z_{st} \end{cases} \quad (3.19)$$

Z_{st} est la valeur de Z calculée quand la proportion entre F et O est stoechiométrique (quand $r Y_F = Y_O$).

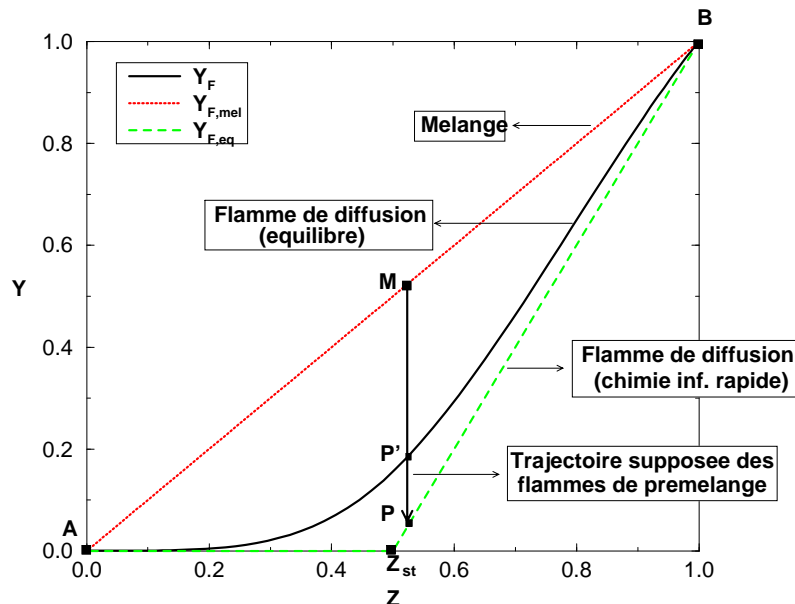


Figure 3.3 : Variation de la concentration massique de l'espèce F en fonction de la fraction de mélange Z ; évolution effective (Y_F), mélange pur sans combustion ($Y_{F,mel} \Rightarrow c = 0$) et équilibre chimique avec chimie infiniment rapide ($Y_{F,eq} \Rightarrow c = 1$). Condition limite: $Y_{F,0} = 1$

Nous supposons donc que l'oxydant et le carburant se mélangent sur la droite $[AMB]$ avant de s'auto-allumer et de brûler en prémélange le long de $[MP]$. La combustion se poursuit alors en diffusion le long de $[AZ_{st}B]$. Si l'hypothèse de non existence de diffusion différentielle entre les espèces chimiques est valable, alors la combustion a en effet lieu à Z constante.

Une variable d'avancement peut alors être écrite:²

$$c = \frac{Y_{F,mel}(Z) - Y_F(Z)}{Y_{F,mel}(Z) - Y_{F,eq}(Z)} \quad (3.20)$$

En réalité, avec les hypothèses concernant la distribution de c que nous avons faites, c'est sa valeur moyenne \bar{c} qui nous intéresse. Elle est calculée en supposant que,

$$\bar{c} = \left(\frac{Y_{F,mel} - Y_F}{Y_{F,mel} - Y_{F,eq}} \right) \approx \frac{Y_{F,mel}(\bar{Z}) - \bar{Y}_F}{Y_{F,mel}(\bar{Z}) - Y_{F,eq}(\bar{Z})} \quad (3.21)$$

²Cette définition a le mérite d'être simple mais elle n'est pas unique. Elle suppose implicitement que la combustion du prémélange se fait à $Z = c_{te}$. Cette hypothèse a été constatée par Poinot *et al.* [86].

Détermination de la pdf de c

La résolution de l'équation 3.17 demande la connaissance de $P(Z, c)$. Des hypothèses simplificatrices peuvent être effectuées de manière à résoudre ce problème. En considérant d'abord que les variables Z et c ne sont pas statistiquement corrélées et ensuite que c est homogène dans la maille de calcul et égale à sa valeur moyenne \bar{c} , alors $P(Z, c)$ peut s'écrire,

$$P(Z, c) = P(Z) \delta(c - \bar{c}) \quad (3.22)$$

où $\delta(c - \bar{c})$ est la fonction de Dirac, centrée sur le point $c = \bar{c}$. Dans le cas du modèle d'auto-inflammation de Zhang *et al.* [15] qui utilise aussi ce genre de formalisme à deux variables, c est par définition indépendant de Z , car les différents termes utilisés dans son calcul résultent de l'intégration des Y_i dans l'espace Z . Dans une version évoluée de ce modèle due à Chang *et al.* [87], la pdf de c est représentée par une fonction β (comme la distribution de Z). Dans ce cas, soit des hypothèses sont effectuées pour modéliser la variance de c à partir de sa valeur moyenne, soit une équation de transport de $\overline{cT^2}$ est écrite et résolue. La pdf de c utilisée dans le modèle de Janicka et Kollmann [85] est une pdf trimodale avec des pics en $c = 0$, $c = 1$ et $c = \bar{c}$,

$$P(c) = a_1 \delta(c) + a_2 \delta(c - \bar{c}) + a_3 \delta(c - 1)$$

A nouveau, la variance de c doit être calculée de manière à connaître les trois paramètres a_1 , a_2 et a_3 associés à cette distribution.

Modèle PDFA: Le taux de réaction moyen

L'expression du taux de réaction moyen s'écrit alors,

$$\bar{\omega}_i = \int_0^1 \rho(Z, \bar{c}) A Y_i(Z, \bar{c}) Y_j(Z, \bar{c}) \exp(-T_a/T(Z, \bar{c})) P(Z) dZ \quad (3.23)$$

avec $P(Z) = \beta(\bar{Z}, \overline{ZT^2})$. Si la variance $\overline{ZT^2}$ est très petite, la distribution de Z s'approche d'une fonction de Dirac centrée sur la valeur moyenne $Z = \bar{Z}$. Les variables qui dépendent de Z sont elles aussi constantes et égales à leurs valeurs moyennes. C'est le cas où le mélange à l'intérieur de la maille est parfait. Le taux de réaction peut dans ce cas être exprimé en fonction des valeurs moyennes,

$$\bar{\omega}_i = \bar{\rho} A \bar{Y}_i \bar{Y}_j \exp(-T_a/\bar{T}) \quad (3.24)$$

Si ce n'est pas le cas, alors l'intégration de l'équation 3.23 doit être effectuée de manière à déterminer le taux de réaction moyen.

Concentrations et température en fonction de \bar{c} et de Z

Nous venons d'établir à partir des équations 3.21 et 3.23 les outils permettant de calculer le taux de réaction moyen pendant la phase d'auto-inflammation. Il faut aussi exprimer les concentrations Y_i et la température T en fonction de \bar{c} et de Z . La définition de \bar{c} (équation 3.21) mène à,

$$Y_i(\bar{c}, Z) = Y_{i,mel} - \bar{c}(Y_{i,mel} - Y_{i,eq}) \quad (3.25)$$

De la même façon, c doit pouvoir être définie en fonction de la température et donc,

$$T(\bar{c}, Z) = T_{mel} - \bar{c}(T_{mel} - T_{eq}) \quad (3.26)$$

où les expressions de T_{mel} et de T_{eq} sont respectivement,

$$T_{mel}(Z) = T_{F,0}Z + T_{O,0}(1 - Z) \quad (3.27)$$

$$T_{eq}(Z) = \begin{cases} T_{O,0} + \frac{Z}{Z_{st}}(T_{ad} - T_{O,0}) & \text{si } Z \leq Z_{st} \\ T_{ad} + \frac{Z - Z_{st}}{1 - Z_{st}}(T_{F,0} - T_{ad}) & \text{si } Z > Z_{st} \end{cases} \quad (3.28)$$

où T_{ad} est la température adiabatique de flamme de diffusion,

$$T_{ad} = \frac{1}{(1 + \phi)} \left(T_{F,0} + \phi T_{O,0} + \frac{Q}{C_p} Y_{F,0} \right) \quad (3.29)$$

Les expressions 3.25 et 3.26 sont des modèles justifiés par l'hypothèse d'une combustion prémélangée s'effectuant le long de [MP] dans le diagramme de la figure 3.3.

Un exemple de calcul de la variable d'avancement a été donné par l'expression 3.20, complétée par les équations 3.18 et 3.19. Nous allons voir maintenant que d'autres expressions peuvent être utilisées dans cette définition. Il faut toutefois garantir que

$$\bar{Y}_i(\bar{c}, Z) = \int_0^1 Y_i(\bar{c}, Z) P(Z) dZ \quad (3.30)$$

avec $Y_i(\bar{c}, Z)$ donnée par l'équation 3.25 et \bar{c} donnée par l'équation 3.21 et que

$$\bar{T}(\bar{c}, Z) = \int_0^1 T(\bar{c}, Z) P(Z) dZ \quad (3.31)$$

avec $T(\bar{c}, Z)$ donnée par l'équation 3.26. Il est possible de montrer que les formulations 3.30 et 3.31, associées aux expressions 3.25 et 3.26, sont indépendantes de la forme de la *pdf* de c si Z et c ne sont pas corrélées.

3.3.3 Chimie non infiniment rapide

L'utilisation des expressions 3.19 ou de 3.28 dans la définition de c implique que lorsque la flamme de diffusion est établie, la chimie doit être infiniment rapide par rapport au mélange turbulent (flamme de Burke-Schumann). Si la chimie n'est pas infiniment rapide, en restant toutefois assez rapide pour que l'équilibre chimique existe, c n'atteindra jamais la valeur 1 et donc, le modèle ne convergera pas vers la flamme de diffusion établie. Les concentrations de carburant et d'oxydant seront dans ce cas non nulles pour $Z = Z_{st}$ et la température restera en dessous de la valeur adiabatique de flamme de diffusion donnée par l'expression 3.29. Sur la figure 3.3, l'évolution du terme $Y_{F,eq}$ ne suivra pas les droites [A, Z_{st} , B] mais plutôt une courbe

du type [A,P',B]. Cette courbe dépendra du rapport entre les temps chimique et turbulent caractéristiques des conditions de l'écoulement et du carburant utilisé. Ce rapport correspond au nombre de Damköhler.

S'il existe un moyen de calculer le lieu des points [P'] pour une réaction chimique en équilibre mais non infiniment rapide, il doit être utilisé à la place de l'équation 3.21. La solution peut être l'emploi d'une bibliothèque de flammelettes. Dans le cas de l'utilisation d'une formulation à chimie simple, cette bibliothèque peut être obtenue analytiquement. Cuenot [21] présente une méthode pour effectuer ce calcul, fondée sur l'analyse asymptotique de flammes de diffusion de Liñan [20]. La forme de la courbe $Y_{F,eq}(\tilde{Z})$ est déterminée en fonction d'un nombre de Damköhler local caractéristique de la flamme, calculé à l'aide des paramètres chimiques du système (température d'activation et facteur pré-exponentielle) et de la dissipation scalaire subie par la flamme,

$$Da = \frac{4\phi A (\rho_f/\rho_0)^3}{(\lambda/\rho_0 C_p) (\partial Z/\partial x)_f^2} (1 + Z_f)^2 \xi^3 \exp\left(-\frac{T_a}{T_{ad}}\right) \quad (3.32)$$

où ϕ est la richesse calculée à partir des concentrations limites,

$$\phi = r \frac{Y_{F,0}}{Y_{O,0}} \quad (3.33)$$

et ξ est le paramètre de l'analyse asymptotique,

$$\xi = \frac{T_{ad}^2/T_a}{Q/C_p Y_{F,0}} \quad (3.34)$$

L'indice f indique la position de la flamme ($Z_f = Z_{st}$) et ρ_0 est la masse volumique de l'espèce F à la température $T_{F,0}$. Dans l'expression 3.32, $(\partial Z/\partial x)_f^2 = \chi_f/2D$. Nous reconnaissons en χ_f la dissipation scalaire évaluée sur la flamme.

Le profil de température peut alors être calculé en fonction de Z , de Da et d'une fonction $\beta_1(\zeta)$,

$$T = T_{ad} - Da^{-1/3} \xi \frac{Q}{C_p} Y_{F,0} (\beta_1 + \delta \zeta) \quad (3.35)$$

où ζ est la variable caractéristique de la zone de réaction, symétrique autour de $Z = Z_{st}$

$$\zeta = \frac{1}{2} \frac{Da^{1/3}}{\xi} \left(\frac{1}{\phi} + 1 \right) (Z - Z_f) \quad (3.36)$$

$$\delta = 2 \frac{\frac{1}{\phi} + \beta}{\frac{1}{\phi} + 1} - 1 \quad (3.37)$$

$$\beta = \frac{T_{O,0} - T_{F,0}}{Q/C_p Y_{F,0}} \quad (3.38)$$

et finalement, β_1 est la solution de l'équation différentielle d'ordre 2,

$$\frac{d^2\beta_1}{d\zeta^2} = (\beta_1^2 - \zeta^2) \exp \left[-Da^{-1/3} (\beta_1 + \delta\zeta) \right] \quad (3.39)$$

soumise aux conditions limites,

$$\begin{aligned} \frac{d\beta_1}{d\zeta}(-\infty) &= -1 \\ \frac{d\beta_1}{d\zeta}(+\infty) &= +1 \end{aligned}$$

L'expression 3.35 est le résultat de la simplification de l'expansion de T dans la zone de réaction en négligeant des termes d'ordre supérieur ou égal à ξ^2 où ξ est petite pour des grandes énergies d'activation,

$$T = T_{ad} - Da^{-1/3} \frac{Q}{C_p} Y_{F,0} \left(\xi\beta_1 + \xi\delta\zeta + \xi^2\beta_2 + \dots \right) \quad (3.40)$$

La résolution du système d'équations 3.32 à 3.39 permet le calcul de la température $T(Z)$ quand le système est en équilibre chimique et donc, le temps chimique est faible devant le temps turbulent caractéristique. De la même façon, $Y_F(Z)$ et $Y_O(Z)$ peuvent être calculées à partir des expressions suivantes,

$$Y_F = Y_{F,0} Da^{-1/3} \xi (\beta_1 + \zeta) \quad (3.41)$$

$$Y_O = Y_{O,0} Da^{-1/3} \xi (\beta_1 - \zeta) \quad (3.42)$$

Nous obtenons ainsi des courbes $Y_i(Z)$ et $T(Z)$ qui prennent en compte des vitesses chimiques finies. En particulier, la fonction $f(\zeta)$ (où ζ est fonction de Z) peut être employée pour remplacer $Y_{F,eq}(Z)$ dans le calcul de c (équation 3.21).

3.3.4 Extension du modèle PDFa à un modèle mixte pdf/flammelettes

Le modèle PDFa doit pouvoir être appliqué pendant les phases de mélange et d'allumage des flammes de diffusion, ainsi que pendant leur établissement. Cependant, dès que la flamme de diffusion s'approche de l'équilibre chimique (situation de flamme établie), plusieurs facteurs peuvent contribuer à ce que le modèle n'arrive plus à suivre le taux de réaction réel:

- Le changement des échelles caractéristiques du problème. Pendant l'auto-inflammation, le temps chimique est grand par rapport au temps de mélange. Quand la flamme de diffusion est établie, les réactions chimiques sont très rapides et le taux de réaction est contrôlé par le taux auquel les réactifs se mélangent.
- La manière dont le terme $Y_{F,eq}$ utilisé dans la définition de la variable d'avancement est calculé reste approximative (analyse asymptotique décrite auparavant ou calcul à partir des expressions 3.19). La valeur de c peut s'approcher de 1 sans jamais y parvenir. Dans ce cas, l'équilibre chimique n'est pas atteint. Il y a donc des chances pour que le mélange soit surestimé. Comme la température est à ce moment très élevée et que le taux de réaction en dépend de manière exponentielle, un mélange non nul implique un fort taux de réaction,

probablement lui aussi surestimé. Il est donc de prévoir une grande sensibilité du modèle par rapport à la valeur de la variable d'avancement c .

- A la limite de Burke-Schumann (chimie infiniment rapide) et si $c = 1$, le modèle PDFA tend vers un taux de réaction nul. Or, nous avons vu dans la section 2.4.3 que le taux de réaction est non nul dans cette situation et que sa valeur est contrôlée par la valeur de la dissipation scalaire caractéristique des points où le mélange est stoechiométrique ($Z = Z_{st}$).
- Enfin, les méthodes à *pdf* deviennent en général imprécises dès que les gradients des grandeurs intervenant dans le calcul du taux de réaction sont forts. C'est le cas des situations de flamme de diffusion établie.

Nous sommes donc devant le deuxième problème de la modélisation de la combustion Diesel mentionné en début de chapitre (le premier concerné la prise en compte du mélange turbulent). Il s'agit de la conception d'un modèle unique capable de traiter des phénomènes physiques avec des échelles caractéristiques très différentes. Le problème de la transition de l'auto-allumage vers une flamme de diffusion établie reste donc à résoudre. Il conviendrait de substituer au modèle PDFA un modèle adapté aux flammes de diffusion après les phases d'allumage et de combustion prémélangée (par exemple, un modèle de flammelettes). Cependant, il faut gérer la transition entre les deux. La variable d'avancement semble à priori le paramètre idéal pour passer d'un modèle à l'autre.

D'autres grandeurs comme le nombre de Damköhler pourraient éventuellement décrire cette transition. Cependant, des difficultés issues de la non univocité de Da en fonction de la température empêchent son application. Cet aspect est traité dans l'annexe C où une analyse des mécanismes d'allumage et d'établissement d'une flamme de diffusion à l'aide du nombre de Damköhler est effectuée.

L'établissement d'une flamme de diffusion est caractérisé, comme il a été vu lors de l'analyse de la figure 3.3, par l'accélération des réactions chimiques de combustion. Dès que la chimie s'approche de l'équilibre, des modèles existent pour déterminer $\bar{\omega}_f$. Nous avons décrit dans la section 2.4.3 un modèle de flamme de diffusion en chimie infiniment rapide, fondé sur le concept de flammelettes laminares, présenté par Bilger [16] et par Williams [18] (nous l'appellerons modèle CHI). Malgré sa simplicité, ce modèle est adapté au système de combustion Diesel étudié. En effet, nous cherchons un modèle vers lequel le taux de réaction moyen converge, lorsque la flamme de diffusion s'établit et que la chimie devient infiniment rapide. Le modèle CHI (équation 2.60) ne fait pas intervenir la concentration des espèces dans sa formulation, mais simplement le gradient de la fraction de mélange (par effet de la dissipation scalaire),

$$\bar{\omega}_F = \frac{1}{2} \bar{\rho}_{st} \tilde{\chi}_{st} \frac{Y_{F,0}}{1 - Z_{st}} P(Z_{st})$$

L'application à la flamme de diffusion d'un modèle de flammelettes implique la validité de ce concept lorsque cette phase est atteinte. Van Kalmthout [68] montre à partir de résultats DNS que dans certaines configurations la flamme de diffusion, une fois établie, est localement mince devant les échelles turbulentes. Cependant, il s'agit de configurations physiques particulières dont la reproductibilité dans un moteur n'est pas assurée. D'un autre côté, Dec [68] montre des visualisations de flammes dans la chambre de combustion dans un moteur Diesel. Ces flammes

présentent des contours minces et bien définis. La flamme de diffusion dans un moteur Diesel semble donc en effet, pouvoir être associée à un phénomène de combustion en flammelles.

3.3.5 Le couplage PDFa/CHI

Nous proposons un couplage entre les modèles PDFa et CHI faisant intervenir une pondération entre les taux de réaction calculés par chacun des modèles.³ Rappelons que l'objectif final est la conception d'un modèle de combustion Diesel complet et dont le taux de réaction des différentes espèces soit une fonction continue des variables de l'écoulement. En principe la variable capable, de façon naturelle, de faire la transition entre les deux modèles est la moyenne de la variable d'avancement \bar{c} . En effet, elle varie entre 0 et 1, la valeur 1 correspondant à une réaction en équilibre chimique. Nous prétendons donc construire une fonction $f(\bar{c})$ telle que,

$$\bar{\omega}_{F,DNS} = [1 - f(\bar{c})] \bar{\omega}_{F,al} + f(\bar{c}) \bar{\omega}_{F,dif} \quad (3.43)$$

où $\bar{\omega}_{F,al}$ est le taux de réaction moyen calculé avec le modèle d'auto-allumage PDFa et $\bar{\omega}_{F,dif}$ celui calculé avec le modèle de flamme de diffusion établie CHI.

³Ce type d'approche avait déjà été proposé par Bilger [16]. Il suggérait la résolution des problèmes où l'équilibre chimique n'existe pas, par des méthodes à deux variables, capables à elles toutes seules de représenter l'ensemble du système réactif. Une de ces variables était par exemple la fraction de mélange et l'autre, la concentration d'une des espèces réactives. Evidemment, il restait à déterminer le taux de consommation moyen de l'espèce réactive. Une des méthodes proposées à cet effet consistait à séparer par exemple la concentration de carburant Y_F en deux parties, $Y_F = Y_{F,eq} + Y_F^*$ où $Y_{F,eq}$ est la contribution qui correspond à la chimie en équilibre infiniment rapide (équation 3.19) et Y_F^* une perturbation de $Y_{F,eq}$ qui n'est pas nécessairement petite. Le taux de réaction de Y_F contient donc une partie correspondant à l'équilibre chimique, qui peut être calculée à travers l'équation 2.60 et une partie modélisant la contribution hors équilibre. Dans le cas que nous avons étudié, cette contribution peut être fondée sur le modèle d'auto-inflammation à *pdf* présumées.

3.4 Conclusion

Les principales difficultés de la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel ont été signalées. Deux problèmes majeurs se posent: D'abord, le traitement du mélange turbulent qui conditionne toute la combustion dès la période d'auto-inflammation jusqu'à la flamme de diffusion établie. Ensuite, la nature très différente des phénomènes physiques qui ont lieu dans la chambre de combustion avant et après l'auto-allumage, qui oblige à l'utilisation de différents modèles et en conséquence, au couplage de ces modèles.

Nous avons commencé par décrire le mélange turbulent non réactif et la manière dont il peut être modélisé. Deux modèles algébriques qui permettent le calcul des quantités mélangées en fonction de la variable de mélange $\overline{Y_F Y_O}$ ont été étudiés. Cependant, du fait que le mélange des espèces réactives dans un moteur soit un phénomène intrinsèquement turbulent, ces modèles algébriques ne semblent pas suffire aux besoins de la modélisation. De plus, leur formulation oblige la spécification de bornes de richesse d'inflammabilité, fonction du carburant utilisé et des propriétés thermodynamiques du système. Un modèle à *pdf* présumées pour le mélange a été finalement introduit.

Si le mélange turbulent non réactif peut être décrit par une approche *pdf* présumées, il est logique de croire que la modélisation du processus d'auto-allumage puisse se servir du même principe (cette approche a déjà été utilisée par plusieurs auteurs [15, 62, 85]). En effet, pendant cette première phase de la combustion Diesel, la consommation des réactifs ainsi que l'augmentation de la température sont faibles. L'écoulement est donc presque non réactif. Un modèle à *pdf* présumées a alors été proposé pour la description des phases de mélange, d'allumage et d'établissement de la flamme de diffusion dans le moteur Diesel (modèle PDFA). Il s'agit d'un modèle à deux variables, la fraction de mélange Z qui décrit l'état du mélange entre le carburant et l'oxydant et une variable d'avancement de la réaction chimique c , qui indique quelle fraction de réactifs mélangés a brûlé pendant la période d'auto-inflammation.

Lorsque la flamme de diffusion s'établit et que la température, ainsi que la consommation des réactifs, deviennent élevées, les hypothèses du modèle PDFA sont plus difficiles à vérifier. Un modèle de flammelles à chimie infiniment rapide est alors proposé pour simuler la dernière phase de la combustion Diesel (modèle CHI). Une fonction de la variable d'avancement cherche à pondérer les taux de réactions issus des deux modèles de manière à ce que la transition entre eux soit continue.

Dans le chapitre suivant, nous essayons de valider les modèles proposés ainsi que leurs hypothèses de conception. Ceci est effectué à partir de résultats de DNS (simulation numérique directe). Le modèle est testé contre deux cas académiques de simulations temporelle et spatiale avant d'être implanté dans un code de calcul RANS ("Reynolds Averaged Navier-Stokes").

Chapitre 4

Validation des modèles et comparaisons avec la DNS

4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, un modèle complet de combustion Diesel a été proposé. Ce modèle est censé résoudre les problèmes majeurs de la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel: La prise en compte du mélange turbulent pendant la période d'auto-inflammation et la continuité entre les différents modules utilisés dans la simulation de toutes les phases de la combustion.

Ce chapitre est dédié à une compréhension plus fine des phénomènes d'allumage et d'établissement de flammes de diffusion caractéristiques de la combustion dans les moteurs Diesel, ainsi qu'à la validation du modèle proposé. Cette compréhension passe par l'étude détaillée des zones de réaction dans des configurations représentatives du problème.

Des études d'allumage et d'établissement de flammes de diffusion pour des géométries et des configurations simplifiées ont été effectuées par exemple par Mastorakos *et al.* [3] et par Van Kalmthout [68] en utilisant la simulation numérique directe (DNS) ou par Liñan [80], Liñan et Crespo [4] ou Liñan et Williams [88, 89] à l'aide d'études asymptotiques de flammes de diffusion laminaires. Ici, des calculs DNS d'établissement de flammes de diffusion turbulentes de Van Kalmthout [68], sont exploités dans le cadre d'une collaboration CRCT (Centre de Recherche pour la Combustion Turbulente). Les résultats des modèles proposés sont aussi comparés à des calculs DNS de Mastorakos d'allumage de flammes de diffusion réalisés à l'IFP.

La simulation numérique directe est un outil très puissant pour étudier les écoulements turbulents [90]. Les équations instantanées de Navier-Stokes sont résolues numériquement pour toutes les échelles de l'écoulement turbulent, sans qu'aucun modèle ne soit utilisé pour les décrire. Des schémas numériques d'ordre élevé concernant les discrétisations spatiale (ordre 6) et temporelle (ordre 3) permettent une grande précision de calcul. L'inconvénient majeur reste la taille des domaines étudiés. La taille des mailles les plus petites doit être inférieure aux plus petites échelles de la turbulence, tandis que la dimension du maillage doit pouvoir couvrir les plus grandes échelles. Un très grand nombre de mailles doit en conséquence être utilisé, ce qui implique un petit domaine de calcul.

Trois études parallèles sont effectuées dans ce chapitre:

- L'observation des résultats DNS, qui permet l'évaluation qualitative du comportement physique du système. La manière dont ces résultats sont interprétés sert de base à la formulation des modèles.
- Des études de diagnostic des résultats DNS qui aident à vérifier les hypothèses derrière les modèles.
- Une étude quantitative de validation des modèles proposés, qui compare leurs résultats avec ceux des simulations DNS.

Dans la première partie de ce chapitre, les différents calculs DNS utilisés sont présentés. Ensuite, les différents modèles de mélange présentés dans la section 3.2 sont testés. Des calculs sont aussi effectués concernant le modèle de mélange à surface de contact qui intègre le modèle de combustion Diesel 3CFM (section 2.5). Enfin, nous allons étudier et tester les hypothèses de conception, ainsi que les résultats obtenus avec le modèle PDFA/CHI.

4.2 Résultats de simulation directe mis à disposition

4.2.1 Couche de mélange spatiale: Données de Van Kalmthout

Les premiers calculs de simulation numérique directe, par rapport auquel les modèles de mélange, ainsi que les hypothèses du modèle PDF/A/CHI et ses résultats sont testés, représentent une couche de mélange non cisailée entre deux espèces initialement non prémélangées (F , carburant et O , oxydant). Les simulations sont bidimensionnelles, x étant la direction de l'écoulement moyen et y sa direction perpendiculaire (figure 4.1). Les conditions des simulations sont les suivantes:

- Pendant la durée des simulations, les deux espèces sont introduites dans le domaine de calcul à la même vitesse, (constante pendant les simulations), comme indiqué par les flèches de la figure 4.1. Les deux écoulements sont turbulents, le spectre de fluctuations contrôlé à l'entrée du domaine (Van Kalmthout [68]).
- 8400 réalisations spatiales d'une simulation de mélange non réactif (F et O sont à la même température) sont disponibles. Le nombre de Reynolds turbulent initial de cette simulation, défini par $Re_t = u' l_t / \nu$ est $Re_t = 104.6$. Cette valeur ne décroît pas beaucoup le long de la simulation.
- 1000 réalisations spatiales de trois simulations avec interaction flamme turbulence (mélange, auto-allumage et établissement d'une flamme de diffusion) sont aussi disponibles. Chaque simulation correspond à un nombre de Reynolds turbulent initial différent. Cas 1: $Re_t = 201.4$, Cas 2: $Re_t = 104.6$, Cas 3: $Re_t = 310.0$. Les bases de données qui correspondent à ces trois simulations ont été complétées dans le cadre de ce travail.
- Les deux espèces ont les mêmes diffusivités moléculaire et thermique,

$$Le = \frac{\lambda}{\rho C_p D} = 1$$

- Dans les cas réactifs, l'espèce O est chaude par rapport à l'espèce F . L'oxydant agit donc comme source de chaleur servant à amorcer la réaction chimique d'auto-allumage.
- La longueur adimensionnelle¹ du domaine d'observation est, dans le cas non réactif $L^+ = 2.75$ et dans le cas réactif $L^+ = 10.0$. Les résultats sont pris respectivement entre $x^+ = 0.75$ et $x^+ = 3.5$ (calcul non réactif) et $x^+ = 1.5$ et $x^+ = 11.5$ (calcul réactif).²
- L'écoulement moyen est supersonique et stationnaire. La vitesse adimensionnelle moyenne est dans le cas non réactif $U^+ = 1.3$ et dans le cas réactif $U^+ = 3.0$. Le fait que les simulations présentées soient supersoniques ne limite pas leur utilisation. En effet, l'écoulement n'est pas perturbé par des ondes de choc ou d'autres phénomènes caractéristiques d'un écoulement supersonique. L'interaction recherchée entre une flamme et un champ turbulent n'est donc pas affectée. Comme dans un écoulement supersonique l'information ne

¹Les équations résolues dans le code NTMIX 2D, avec lequel les calculs DNS ont été effectués, sont écrites dans leur forme adimensionnelle. Le symbole + indique des variables sans dimensions.

²La longueur adimensionnelle L^+ est calculée par rapport à une longueur de référence ($L^+ = L/L_{ref}$), où L_{ref} est déterminée à partir du nombre de Reynolds acoustique choisi pour le problème $Re_{ac} = (aL/\nu)_{ref} = 10000$ (a est la vitesse du son dans les conditions de référence). Dans les calculs présentés, l'état de référence choisi (ref) est celui de l'air à la température initiale du carburant. Des détails sur l'adimensionalisation des différentes grandeurs intervenant peuvent être retrouvés dans la thèse de Van Kalmthout [68].

peut pas remonter l'écoulement, cette étude est équivalente à une simulation 1D temporelle. Les raisons de l'utilisation d'une simulation DNS supersonique sont présentées dans la section 4.6.1.

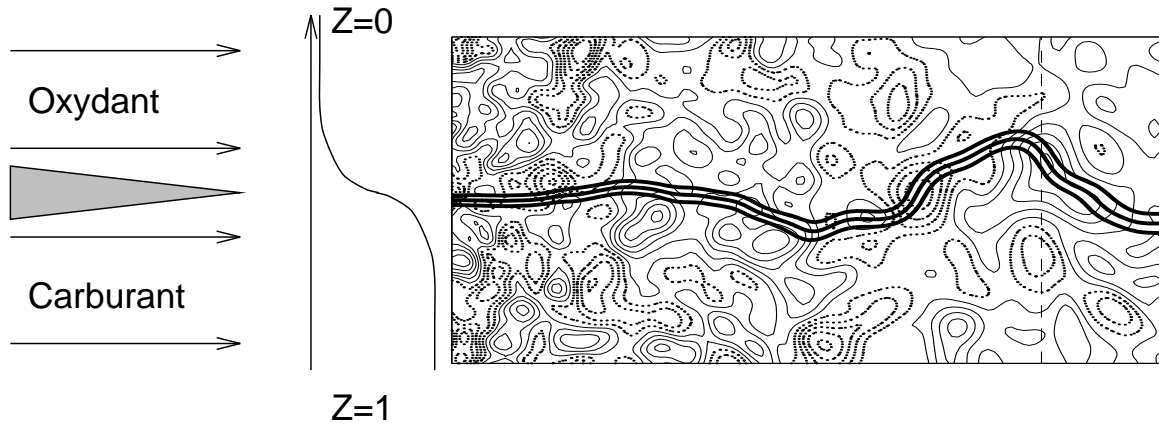


Figure 4.1 : Domaine de calcul. Iso-contours de Z (trait épais), $Z=0.25$, $Z=0.5$, $Z=0.75$ et de vorticité (trait normal), d'après Van Kalmthout.

4.2.2 Couche de mélange temporelle: Données de Mastorakos

Les résultats du modèle PDFa/CHI sont aussi testés par rapport à un calcul DNS de couche de mélange temporelle qui simule l'auto-allumage et l'établissement d'une flamme de diffusion entre du carburant froid et de l'oxydant chaud séparés à l'instant initial. Il s'agit d'une simulation bidimensionnelle, non stationnaire, avec une turbulence décroissante. La figure 4.2 représente le champ de vorticité dans le domaine de calcul à un instant donné, associé aux iso-lignes de fraction de mélange. Il faut noter que même si instantanément, il s'agit d'un calcul bidimensionnel, en moyenne l'écoulement est 1D. Il existe une direction homogène (direction y^+ parallèle au champ initial de fraction de mélange) selon laquelle les moyennes des différents paramètres sont calculées. Dans les simulations spatiales et stationnaires, cette direction est le temps (les moyennes sont calculées à partir des différentes réalisations du même écoulement au cours du temps). Le grand nombre de réalisations disponible dans ce cas permet d'ailleurs un calcul statistique de meilleure qualité que celui qui est possible avec la simulation temporelle.

La figure 4.2 montre que dans ce système, la turbulence agit non seulement sur le plissement de la structure de mélange, mais aussi sur l'intérieur de cette structure (variation de la distance entre les iso-lignes de fraction de mélange). Nous pouvons observer que sur les zones de forte courbure, le gradient de la fraction de mélange diminue, tandis que sur les régions non courbées, ce gradient est fort. L'influence de la turbulence sur l'auto-inflammation et l'établissement d'une flamme de diffusion, lorsque la structure interne de la zone de mélange est changée, peut ainsi être évaluée à partir de la présente étude.

La figure 4.3 montre le taux de réaction et les iso-lignes de la fraction de mélange dans le domaine de calcul à deux instants différents (respectivement, pendant l'apparition de la première hausse importante du taux de réaction et lorsque la flamme de diffusion est établie).

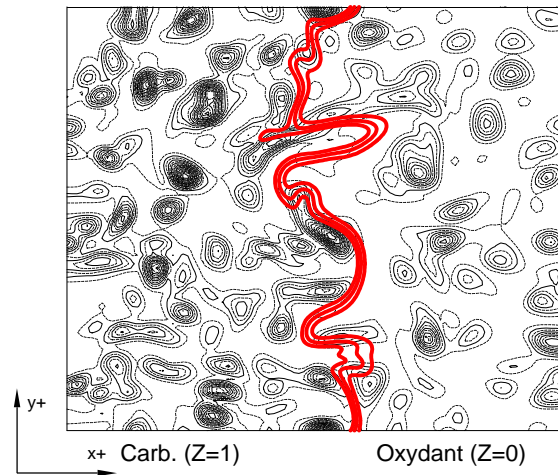


Figure 4.2 : Domaine de calcul. Iso-contours de Z (trait épais) et de vorticité (trait normal). Calcul effectué à Reynolds turbulent initial $Re_t = 211.0$. Les longueurs adimensionnelles selon x et y sont $L_x^+ = L_y^+ = 4.0$.

Il est important de noter l'influence de la turbulence sur la structure interne de la zone de réaction et sur le taux de réaction caractéristique de la flamme de diffusion.

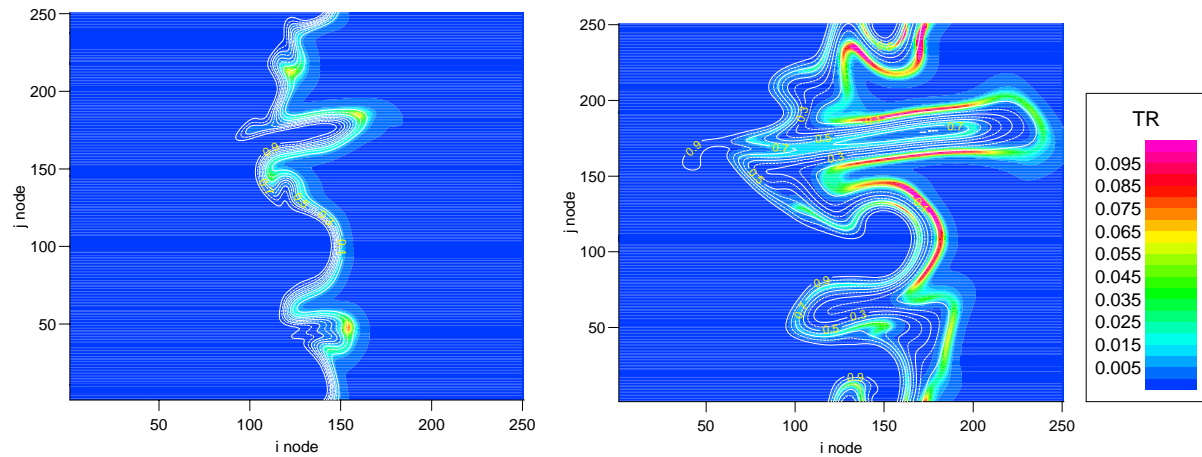


Figure 4.3 : Taux de réaction et fraction de mélange instantanés: Lors de l'auto-inflammation et flamme de diffusion établie.

4.3 Validation des modèles de mélange non réactif

Dans la section 3.2 des modèles pour calculer le mélange entre deux espèces dans un écoulement turbulent non réactif ont été proposés. Les résultats DNS de couche de mélange spatiale non réactive, issus des simulations présentées ci-dessus, vont servir au test et à la validation de ces modèles.

4.3.1 Equation de transport du mélange moyen $\overline{Y_F Y_O}$

L'étude du mélange turbulent a été fondée sur le comportement et évolution de la variable $\overline{Y_F Y_O}$, qui peut être calculée à partir de son équation de transport (équation 3.1). L'évolution de $\overline{Y_F Y_O}$ est présentée sur la figure 4.4 pour trois profils du domaine de calcul perpendiculaires à la direction de l'écoulement moyen.

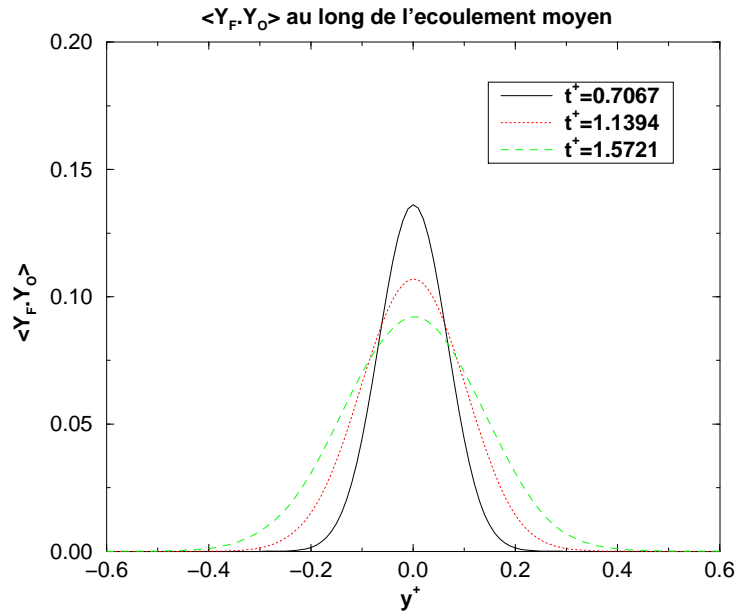


Figure 4.4 : Evolution du mélange moyen non réactif $\overline{Y_F Y_O}$ en DNS le long du domaine de calcul ($t^+ = x^+/U^+$ est le temps adimensionnel).

Les trois courbes montrent que le mélange moyen maximal décroît le long de l'écoulement mais qu'en même temps, le mélange diffuse de plus en plus vers les frontières du domaine. Cette évolution est due à la manière dont le profil de mélange est initialisé à l'entrée du domaine de calcul. Pour des raisons de résolution numérique, le profil initial de concentrations de Y_F et de Y_O correspond à la solution laminaire de l'équation de transport et de diffusion d'une espèce sans réaction chimique,

$$\frac{\partial Y_i}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(D \frac{\partial Y_i}{\partial x_k} \right) \quad (4.1)$$

La valeur d'entrée de $\overline{Y_F Y_O}$ à $x^+ = x_0^+$ est donc égale à sa valeur maximale $(\overline{Y_F Y_O})|_{x_0^+} = (\overline{Y_F Y_O})_{x_0^+}$ qui correspond à la solution laminaire où F et O sont complètement mélangés.

L'aplatissement des profils de mélange ne veut pas dire que le mélange soit détruit (il n'y a pas de termes de destruction de mélange $\overline{Y_F Y_O}$ dans l'équation 3.1) mais qu'en raison des fluctuations turbulentes, il y a de moins en moins de probabilité de trouver du mélange au centre du domaine. En conséquence, les probabilités d'en trouver près des frontières augmentent au fur et à mesure.

Dans cette étude nous avons aussi extrait de la DNS les différents termes de l'équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$ et vérifié que leur somme est effectivement nulle. Ensuite, et avant de commencer l'étude de la modélisation du mélange turbulent, le dernier terme de l'équation 3.1, qui dans un code moyen doit être modélisé, a été testé par rapport au modèle proposé (équation 3.4).

Fermeture de l'équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$

Les termes de l'équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$ ont été calculés sur trois profils $x^+ = C_{te}$ (figure 4.5) Les quatre courbes représentées dans chaque graphique montrent les profils suivants:

$$convection = \frac{\partial}{\partial x_k} \bar{u}_k \overline{Y_F Y_O} + \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{u'_k (Y_F Y_O)'} \quad (4.2)$$

$$diffusion = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(D \frac{\partial}{\partial x_k} \overline{Y_F Y_O} \right) \quad (4.3)$$

$$dissipation = 2D \left(\frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{Y}_O}{\partial x_k} + \overline{\frac{\partial Y'_F}{\partial x_k} \frac{\partial Y'_O}{\partial x_k}} \right) \quad (4.4)$$

$$bilan = convection - diffusion + dissipation \quad (4.5)$$

La dérivée de $\overline{Y_F Y_O}$ par rapport au temps n'est pas représentée, car l'écoulement moyen est stationnaire.

L'analyse de ces bilans semble montrer que l'équation n'est pas bien fermée, car au milieu du domaine, le bilan n'est pas nul. Il s'agit cependant d'un problème de nature numérique. En effet, les courbes obtenues sont issues de moyennes calculées par rapport à un certain nombre de réalisations de l'expérience numérique effectuée. Or, en principe, si le calcul est stationnaire, au bout d'un certain nombre de réalisations, la valeur moyenne calculée devrait converger vers la moyenne statistique. Cependant, si la valeur d'une certaine grandeur fluctue beaucoup entre les différentes réalisations, beaucoup de réalisations peuvent être nécessaires pour que la valeur calculée s'approche de la moyenne statistique envisagée. C'est le problème du terme de convection. En raison de la très forte vitesse de l'écoulement moyen, la convergence de ce terme est difficile et n'est pas obtenue dans les 8400 réalisations calculées. En observant ce qui se passe dans des plans $x^+ = C_{te}$ à gauche et à droite du plan $N_x = 50$ (figure 4.6), nous voyons que pour des plans adjacents, la forme du terme de convection varie beaucoup. Nous avons donc calculé les termes de convection en chaque plan en faisant la moyenne entre les valeurs du plan de calcul lui-même et des deux plans qui lui sont adjacents. Globalement, les résultats sont améliorés. Des moyennes du terme de convection ont aussi été calculées avec deux plans à gauche et deux plans à droite et encore une fois, des améliorations ont été observées.

Modélisation du terme de dissipation

Nous avons cherché à représenter le rapport entre le terme de dissipation χ exact (équation 3.3)

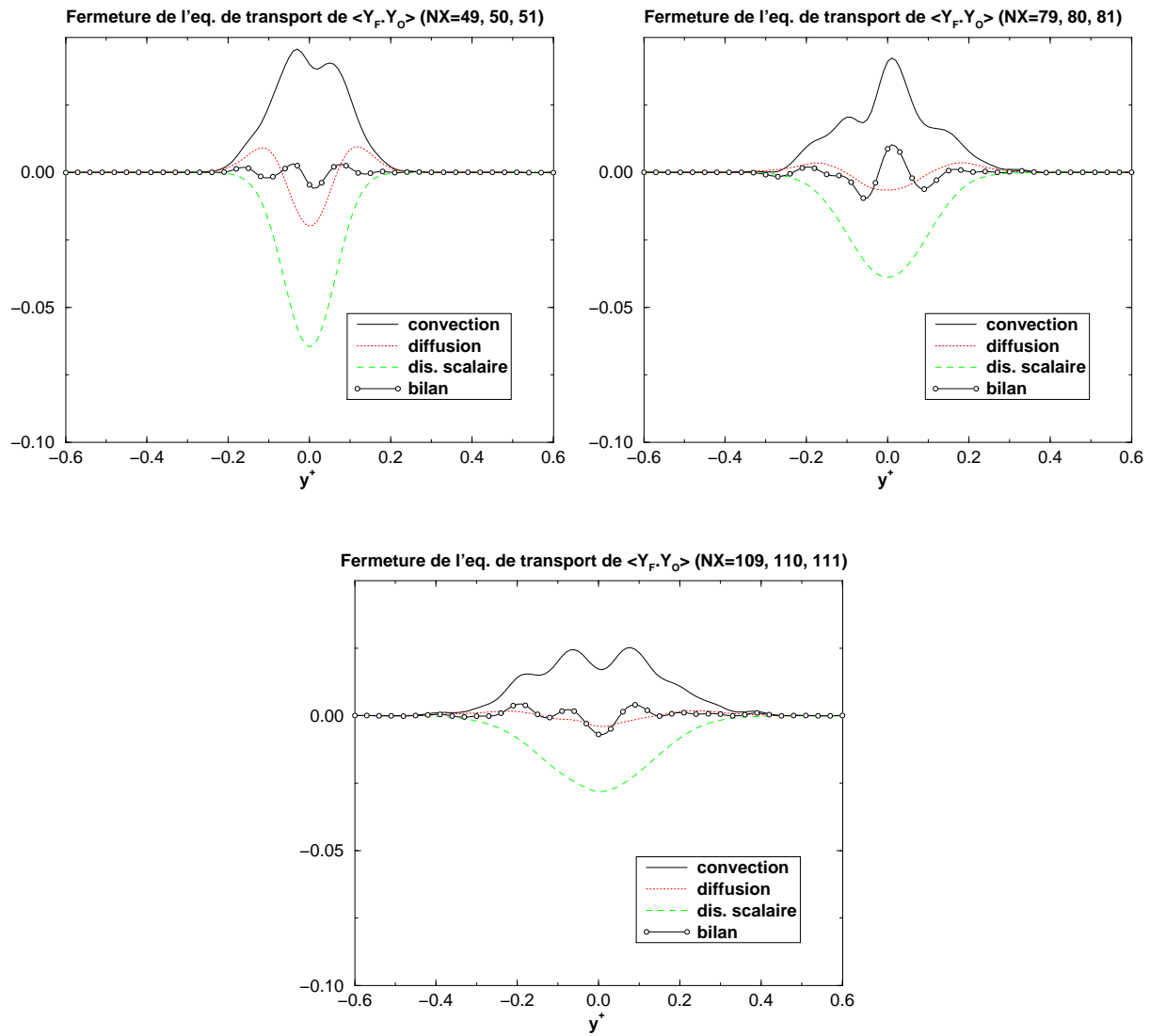


Figure 4.5 : Bilan aux différents termes de l'équation de mélange.

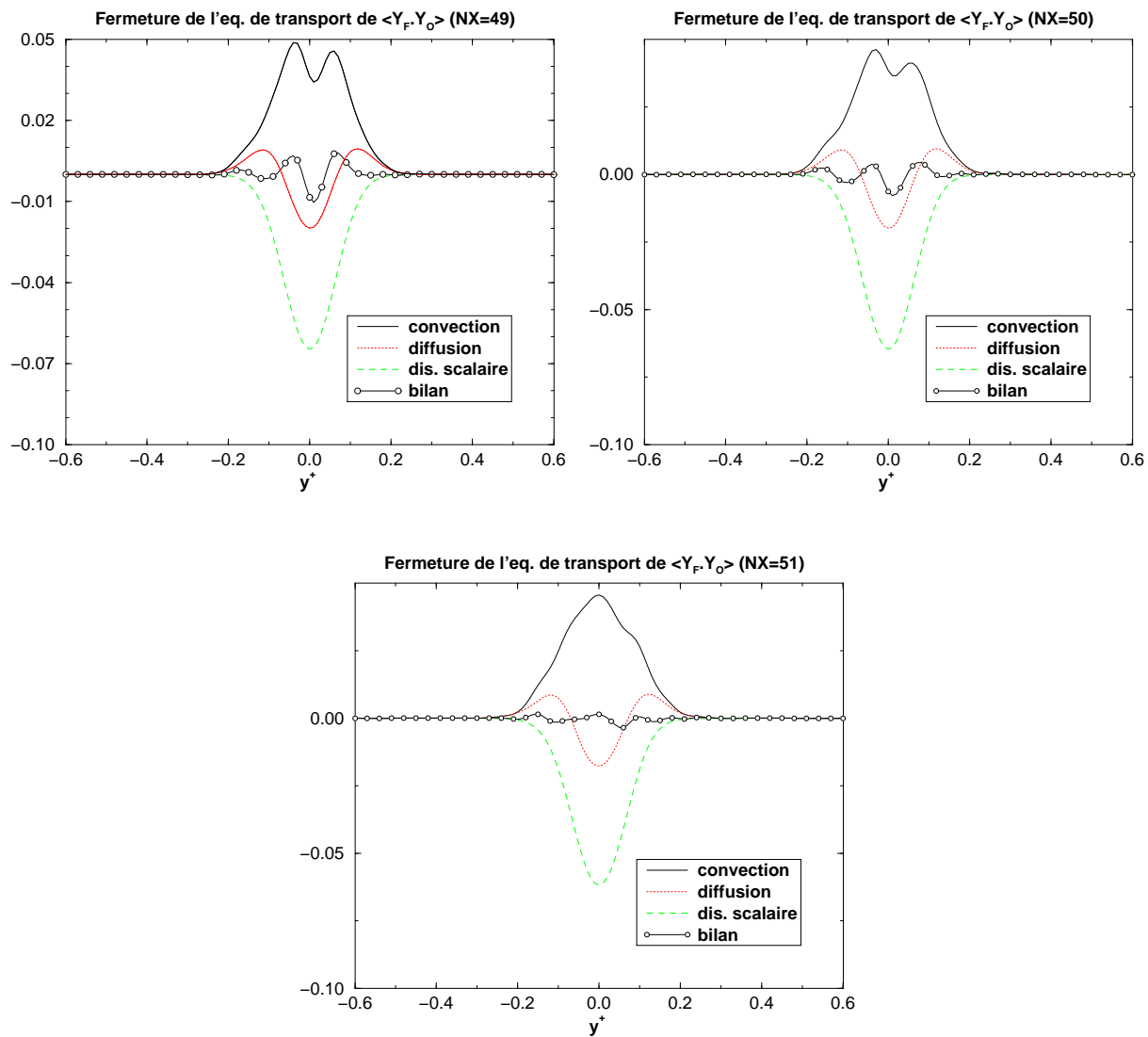


Figure 4.6 : Fluctuations du terme de convection dans des plans adjacents.

$$\chi = 2D \frac{\overline{\partial Y'_F \partial Y'_O}}{\partial x_k \partial x_k}$$

extrait de la DNS et son modèle (équation 3.4) et regardé si la proportionnalité présumée entre le taux de dissipation des fluctuations scalaires $[\chi/\overline{Y'_F Y'_O}]$ et le taux de dissipation des fluctuations de vitesse $[\epsilon/k]$ existe. Les résultats, obtenus pour trois profils $x^+ = C_{te}$, sont représentés sur la figure 4.7 en fonction de la fraction de mélange moyenne $[\bar{Z} = \bar{Y}_F/Y_{F,0}]$. La proportionnalité entre les deux termes s'établit au fur et à mesure que l'écoulement s'éloigne de l'entrée du domaine de calcul. Sur un profil x^+ proche de la sortie (correspondant à $t^+ = 1.5721$), cette condition est vérifiée pour une région assez large (entre $\bar{Z} = 0.2$ et $\bar{Z} = 0.8$). La constante de proportionnalité C_D de l'équation 3.4 vaut dans cette région entre 3 et 4.

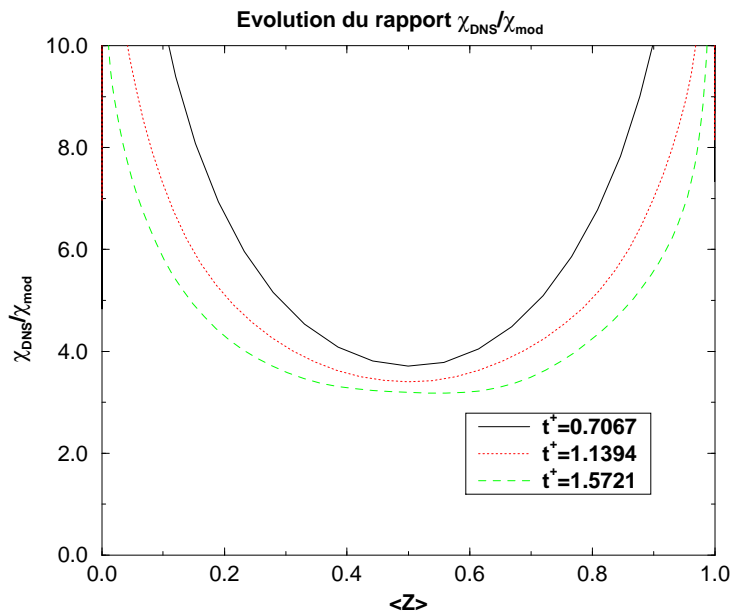


Figure 4.7 : Rapport entre la partie fluctuante de la dissipation scalaire et son modèle.

En comparant le temps t^+ de séjour du fluide dans le domaine de calcul avec le temps turbulent caractéristique initial $\tau_0^+ = \epsilon_0^+/k_0^+$, nous obtenons un facteur d'environ 10 entre les deux ($\tau_0^+/t^+ \approx 10$). Ceci nous permet de conclure que très rapidement, par rapport aux échelles turbulentes caractéristiques du problème, le modèle permet de retrouver des valeurs de χ proches des valeurs mesurées en DNS. En plus, en début de calcul, même si le modèle ne représente pas bien la réalité, la partie fluctuante de la dissipation scalaire $2D \frac{\overline{\partial Y'_F \partial Y'_O}}{\partial x_k \partial x_k}$ est négligeable par rapport à la partie faisant intervenir les gradients des concentrations moyennes $2D \frac{\partial \bar{Y}_F}{\partial x_k} \frac{\partial \bar{Y}_O}{\partial x_k}$. L'importance de χ est donc négligeable au début du processus de mélange dans la configuration étudiée.

4.3.2 Test des modèles algébriques de mélange

Dans la section 3.2.2, deux modèles de calcul de la concentration des espèces mélangés ont été présentés (équations 3.8, 3.9 et 3.11). Il s'agit de modèles algébriques qui calculent les Y_{p_i} à partir des valeurs locales de $\overline{Y_F Y_O}$, de $\overline{Y_F}$ et de $\overline{Y_O}$.

Dans la figure 4.8, Le coefficient C_{mel} défini dans l'expression 3.8 est tracé en fonction de la coordonnée transverse Y^+ . Le fait que, sur les bords du domaine de calcul, C_{mel} soit proche de l'unité s'explique par la faible valeur des fluctuations de $\overline{Y_F Y_O}$, ce qui implique $\overline{Y_F Y_O} \approx \overline{Y_F} \overline{Y_O}$. Sur les bords du domaine, tout le carburant et tout l'oxydant sont donc mélangés si l'on emploie cette définition. Nous rappelons cependant que pour que le modèle soit complet, il faut définir des bornes d'inflammabilité (qui dépendent du carburant utilisé).

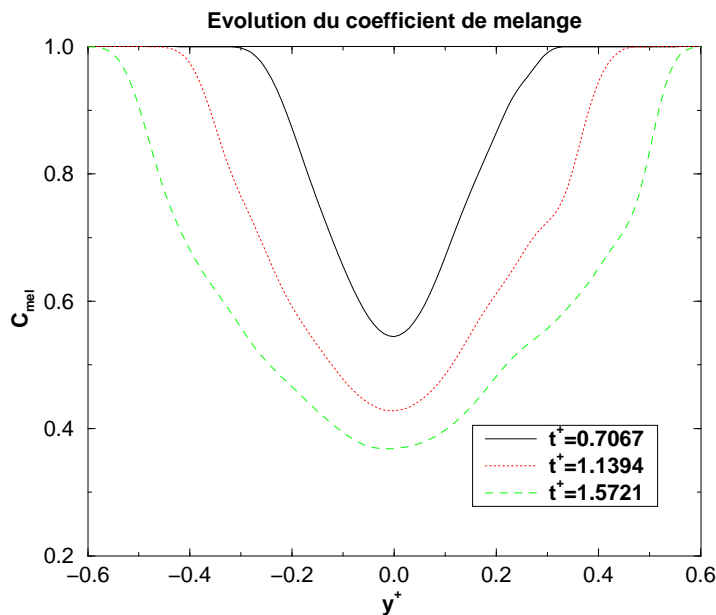


Figure 4.8 : Evolution du coefficient de mélange le long du domaine de calcul pour trois profils $t^+ = x^+/U^+$.

Les résultats obtenus par comparaison entre les deux modèles et les mesures de DNS sont présentés sur la figure 4.9. Les mesures sont loin des prévisions effectuées par les deux modèles proposés. La coïncidence entre les résultats de Veynante et de la DNS entre $Y^+ = 0$ et $Y^+ = 0.2$ est due au choix des bornes de fraction de mélange inflammable utilisés pour la définition d'espèce prémélangée (équation 3.7). En effet, aucun des modèles n'inclut directement dans sa formulation ce type d'information. Les relations algébriques proposées pour déterminer les Y_{p_i} ne sont donc pas suffisantes. En choisissant comme définition d'espèce prémélangée l'expression 3.7, une autre approche doit être utilisée pour le calcul du prémélange.

4.3.3 Test du modèle de mélange à *pdf* présumées

Dans la section 3.2.3, nous avons décrit la façon dont le mélange turbulent pouvait être calculé à partir d'une méthode à *pdf* présumées. L'hypothèse a été faite que les *pdf* de la fraction de

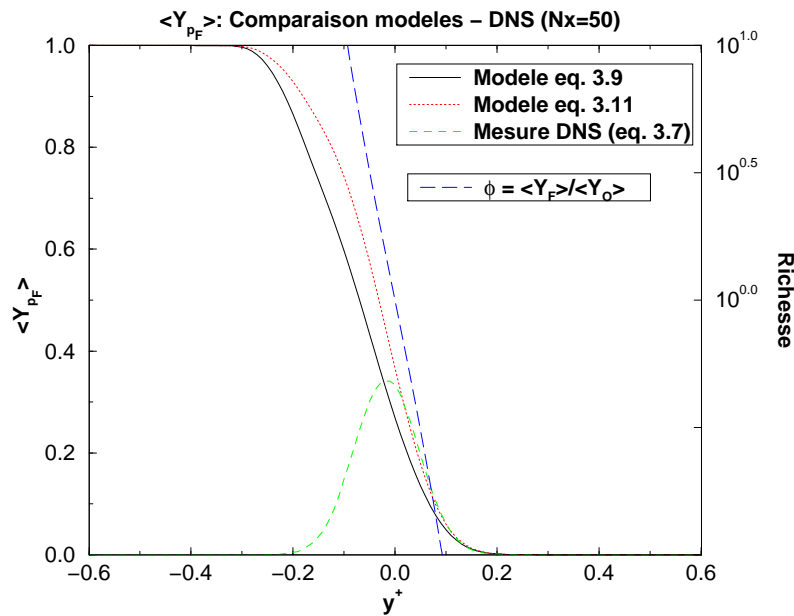


Figure 4.9 : Comparaison entre les modèles de \bar{Y}_{p_F} et sa valeur calculée en DNS conditionnée à une richesse variant entre 0.1 et 10.

mélange sont des fonctions β qui dépendent de la moyenne et de la variance de la fraction de mélange (\bar{Z} et $\overline{Z'^2}$ respectivement).

Sur la figure 4.10, $P(Z)$ mesurée sur trois points différents de l'écoulement est comparée avec $\beta(\bar{Z}, \overline{Z'^2})$ relative aux mêmes points. Z et $\overline{Z'^2}$ sont aussi mesurés dans la DNS (et pas modélisés). Un très bon accord est obtenu entre les résultats de la DNS et les calculs avec les fonctions β . La *pdf* de la variable aléatoire Z est donc complètement déterminée à partir de l'écoulement moyen plus une équation modélisée de transport de sa variance $\overline{Z'^2}$.

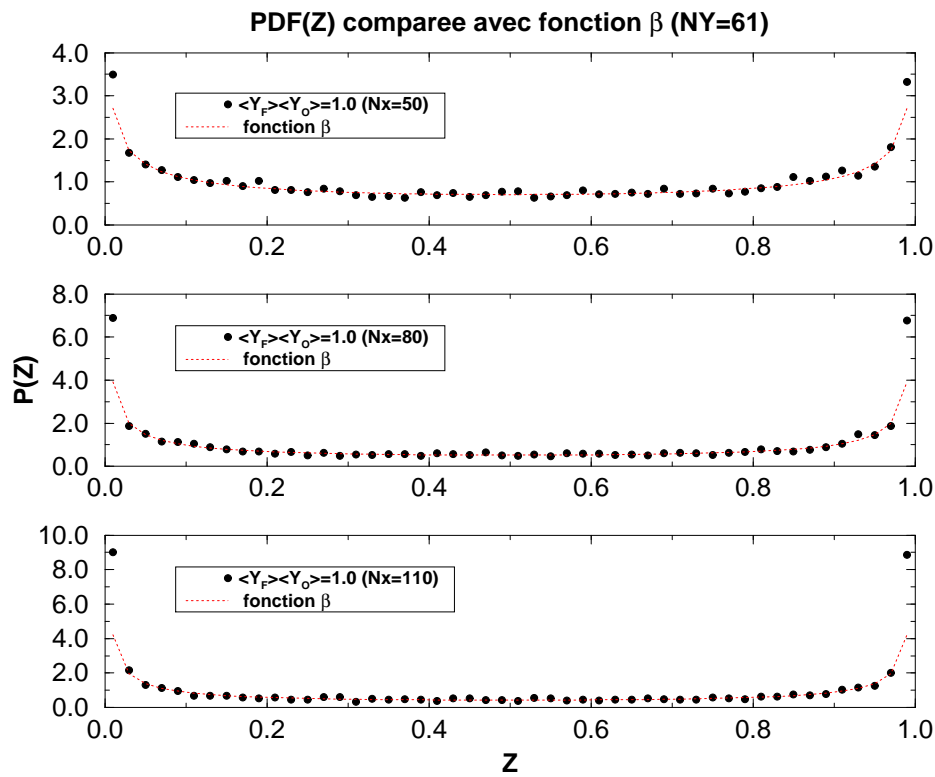
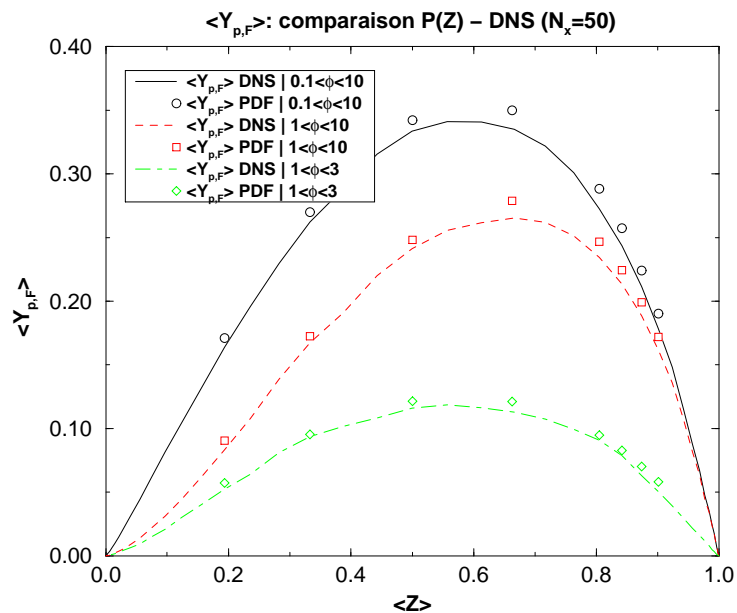
Nous avons ainsi une méthode de détermination de la quantité d'espèces prémélangées (Y_{p_i}) présentes dans le domaine de calcul (équation 3.12). La figure 4.11 montre la comparaison entre Y_{p_F} calculée en DNS (équation 3.7) et modélisée à l'aide de la fonction β pour différentes valeurs de richesses limites de mélange. De bons résultats sont ainsi obtenus.

4.3.4 Test des hypothèses du modèle de mélange à surface de contact

Nous avons vu dans la section 2.5.4 qu'une des principales difficultés de l'utilisation d'un modèle de mélange à surface de contact est le manque de données permettant la validation de ces hypothèses. Ici, nous cherchons à vérifier l'hypothèse de base du modèle, c'est à dire, que le taux de formation du prémélange $\bar{\omega}_{p_i}$ est proportionnel à la densité d'une certaine surface d'iso-concentrations dans toute l'épaisseur de la zone de mélange,

$$\bar{\omega}_{p_i} = V_{c_i} \Sigma_c \quad (4.6)$$

Quand la grandeur à modéliser est le taux de réaction dû à la combustion d'une espèce i , cette

Figure 4.10 : Approximation de la *pdf* de Z par une distribution β .Figure 4.11 : Comparaison entre la quantité de carburant mélangé calculée à partir d'un approche *pdf* présumée et mesurée en DNS.

proportionnalité est facile à tester expérimentalement, car le taux de réaction est calculé en fonction de la chimie utilisée. Dans un problème de mélange, il faut déterminer une formulation équivalente pour le taux de formation du prémélange. Ceci passe par l'analyse de l'équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$ (équation 3.1). Nous avons supposé que la quantité de prémélange formé est proportionnelle à $\overline{Y_F Y_O}$. Ceci implique que le terme source dans l'équation de transport de $\overline{Y_F Y_O}$ doit être aussi la source du prémélange effectif. Ce terme source est la dissipation scalaire moyenne, qui peut donc être vue comme une sorte de taux de réaction de formation de mélange.

Nous avons comparé la densité moyenne d'une surface d'iso-concentration ($Z = 0.5$) avec la dissipation scalaire moyenne sur le même profil $x^+ = C_{te}$. Une vitesse de diffusion des espèces à travers la surface de contact V_c est ainsi obtenue,

$$V_c = \frac{\Sigma_c}{\bar{\chi}} \quad (4.7)$$

Les résultats sont présentés sur la figure 4.12. La proportionnalité présumée par le modèle entre la densité de surface de contact et la dissipation scalaire est présente au long des profils de calcul entre $\bar{Z} = 0$ et $\bar{Z} = 1$. De plus, dans ce cas particulier, la constante de proportionnalité est la même pour tous ces profils (autour de 100). Dans la section 2.5.4, il a été vu qu'une des difficultés majeures à l'application du modèle de mélange à surface de contact était la difficulté de calculer les vitesses de diffusion des espèces à travers la surface (V_{c_i}). Ceci parce que la structure normale au front de mélange change en général le long de ce front comme il a été montré sur la figure 2.15. Dans cette figure, des changements de l'épaisseur de la zone de mélange (entre $Z = 0$ et $Z = 1$) peuvent être observés. Or, dans les configurations DNS spatiales ici utilisées, ce n'est pas le cas. La turbulence intervient au niveau du plissement des iso-lignes de fraction de mélange, mais elle n'arrive pas à changer la structure interne du mélange. Ces lignes restent donc parallèles le long du domaine. La vitesse de diffusion d'une espèce i à travers la surface de contact reste ainsi constante.

Les résultats obtenus confirment l'idée que le mélange turbulent peut, en certaines conditions, être modélisé par une surface de contact. Cependant, l'idée déjà présentée dans la section 2.5.4 que la dissipation scalaire est la grandeur naturelle pour décrire le mélange est aussi confirmée.

4.3.5 Conclusion

Nous avons étudié le mélange en phase gazeuse de deux espèces, évoluant dans un écoulement non cisailé et non réactif du type couche de mélange calculé par DNS. L'objectif était la validation de modèles de calcul du mélange turbulent, applicables dans des codes RANS ("Reynolds Averaged Navier Stokes").

Le comportement de l'équation de transport de la grandeur représentative du mélange $\overline{Y_F Y_O}$ a été étudié. Un bilan a été fait aux différents termes de cette équation. Le bilan est fermé, malgré des oscillations visibles autour de la zone de mélange (dus à la convergence lente du terme de transport convectif). Les résultats ont été améliorés en calculant le terme convectif moyen entre plusieurs plans adjacents.

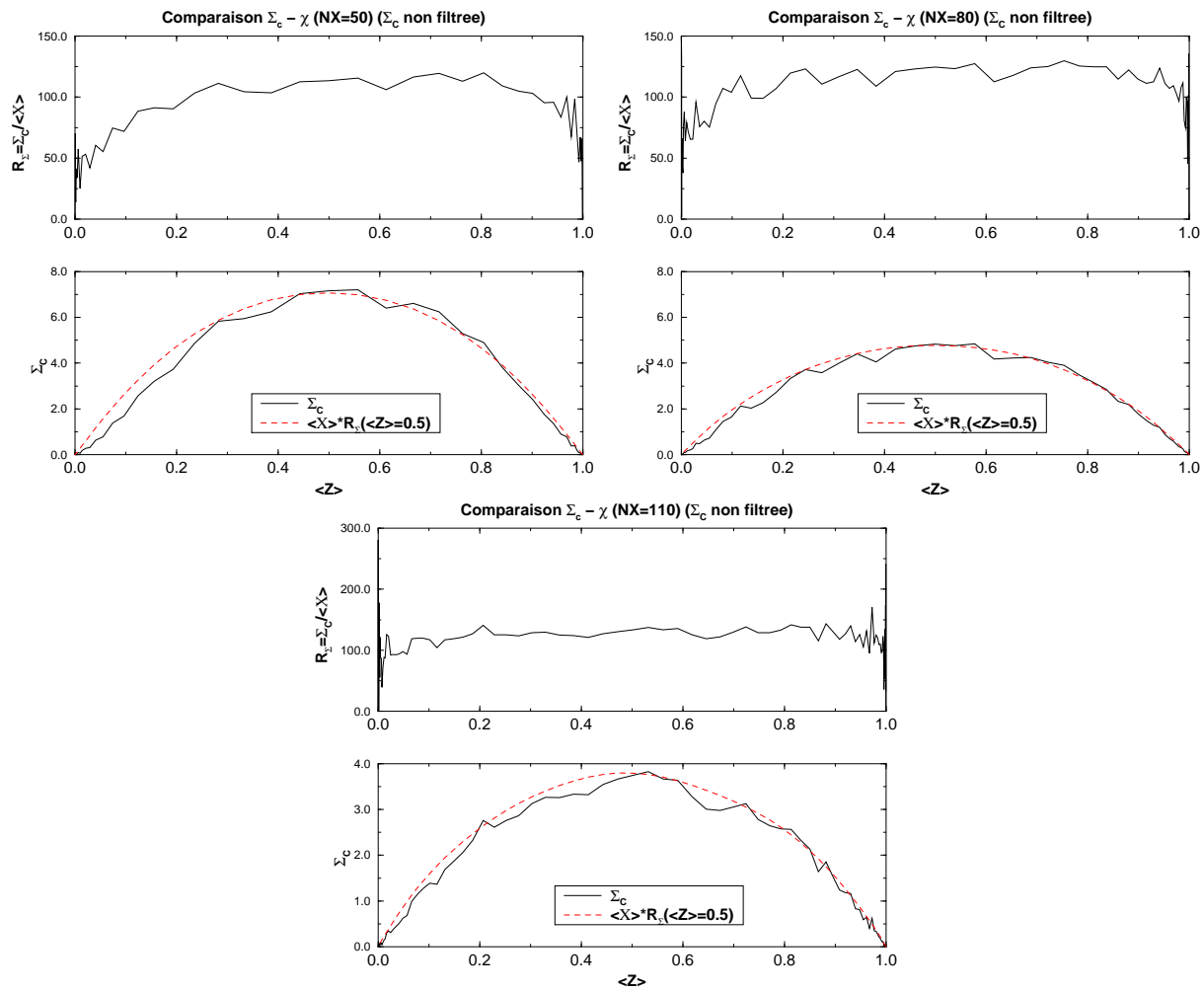


Figure 4.12 : Rapport entre la densité de surface de contact à $\bar{Y}_F = 0.5$ et la dissipation scalaire sur les profils $x^+ = 1.90$, $x^+ = 2.58$ et $x^+ = 3.27$.

Ensuite, nous avons procédé à la validation du modèle utilisé dans le calcul de la partie fluctuante du terme de dissipation de l'équation de $\overline{Y_F Y_O}$. Un modèle algébrique classique est applicable avec une constante C_D variant entre 3 et 4. Le modèle ne représente pas bien la réalité pour des temps qui sont très petits par rapport aux échelles du problème. L'importance de ce fait est réduite, car durant les premiers instants de mélange, la partie fluctuante de la dissipation de $\overline{Y_F Y_O}$ est négligeable par rapport au terme qui correspond aux gradients des concentrations moyennes.

Deux modèles algébriques de calcul des concentrations des espèces mélangées en fonction de $\overline{Y_F Y_O}$ ont été étudiés. Aucun de ces deux modèles ne s'est montré satisfaisant. Le calcul du mélange a alors été effectué à partir de la distribution de probabilité de la fraction de mélange. Les résultats des simulations DNS ont montré qu'il est légitime de présumer la distribution de Z à partir de fonctions β dans le cas d'un écoulement non réactif.

Finalement, nous avons étudié la validité du concept régissant l'application d'un modèle de surface de contact (surface d'iso-concentration) à la formation du mélange turbulent. La proportionnalité entre la densité de surface de contact et la grandeur qui est censée représenter le taux moyen de mélange (la dissipation scalaire moyenne) existe dans la zone de mélange et est la même dans tous les profils étudiés.

L'exploitation d'une base de données DNS a permis la résolution du problème du mélange non réactif. Dans la prochaine section, des bases de données concernant des écoulements turbulents avec réaction chimique et fort dégagement de chaleur sont analysées. Le modèle complet de combustion Diesel proposé dans le chapitre précédent (modèle PDF/A/CHI) peut alors être testé.

4.4 Modèle PDFA/CHI: Tests sur couche de mélange spatiale

Le modèle de combustion Diesel proposé (modèle PDFA/CHI dont la formulation est rappelée dans le tableau 4.1³), ainsi que les hypothèses nécessaires à sa formulation, sont testés à partir de résultats DNS de couche de mélange spatiale (section 4.2). Ces résultats sont présentés en fonction de l'instant d'auto-allumage, qui permet la définition d'un temps de référence ($t_{ref}^+ \simeq 2.33$). Tous les résultats DNS calculés en fonction du temps sont représentés en fonction de la variable $\tau^+ = t^+/t_{ref}^+$.

Modèle	Formulation
PDFA ($\tilde{\omega}_{F,al}$)	$\int_0^1 \rho(Z, \bar{c}) A Y_F(Z, \bar{c}) Y_O(Z, \bar{c}) \exp(-T_a/T(Z, \bar{c})) P(Z) dZ$
CHI ($\tilde{\omega}_{F,dif}$)	$\frac{1}{2} \bar{\rho}_{st} \tilde{\chi}_{st} \frac{Y_{F,0}}{1-Z_{st}} P(Z_{st})$
PDFA/CHI ($\tilde{\omega}_F$)	$[1 - f(\bar{c})] \tilde{\omega}_{F,al} + f(\bar{c}) \tilde{\omega}_{F,dif}$

Tableau 4.1 : Rappel des modules et de l'ensemble du modèle d'allumage et de combustion Diesel PDFA/CHI.

4.4.1 Tests sur la variable d'avancement c et sur les pdf de c et de Z

La première hypothèse qui a été avancée lors de la formulation du modèle PDFA concerne la définition de la variable d'avancement c et la manière dont sa valeur moyenne \bar{c} est déterminée. L'équation 3.21 suppose que la valeur moyenne de la variable d'avancement peut être calculée en fonction des valeurs moyennes des différents paramètres qui interviennent dans sa définition (équation 3.20). Cette hypothèse a été testée en DNS. Les résultats sont présentés sur la figure 4.13 qui montre qu'au moins pendant la période d'auto-inflammation (jusqu'à $\tau^+ = 1.0$), la valeur de \bar{c} est correctement calculée à partir de son modèle.

A partir de $\tau^+ = 1.0$ une discontinuité dans la dérivée de \bar{c} modélisée est aperçue pour de valeurs de $\bar{Z} = Z_{st}$ (changement de la pente de la courbe \bar{c}_{mod}). Ceci est dû à la manière dont la fonction $Y_{F,eq}(\bar{Z})$ dans l'équation 3.21 est calculée. En effet, $Y_{F,eq}(\bar{Z})$ est déterminée à partir des expressions 3.19, qui correspondent à une situation limite où la flamme de diffusion établie brûle les réactifs en chimie infiniment rapide. Or, dans les calculs DNS utilisés, la flamme de diffusion tend vers l'équilibre chimique mais pas vers la situation limite de flamme de Burke-Schumann (courbes $Y_{instant.}$ de la figure 4.14), ce qui justifie le fait d'avoir traité le problème de la chimie non infiniment rapide dans la section 3.3.3.

Les conséquences de cette approximation sont claires. La figure 4.15 montre pour plusieurs points du profil $\tau^+ = 1.57$ l'évolution de c en fonction de Z pendant toutes les réalisations du calcul DNS. Une grande densité de points dont la valeur de c est inférieure à 1 est en effet présente pour des valeurs de Z proches de $Z = Z_{st}$. Dans ce cas, le modèle PDFA ne peut pas décrire l'établissement de la flamme de diffusion. Ceci explique pourquoi le changement de pente est apparu dans les courbes de \bar{c}_{mod} de la figure 4.13.

³Dans le calcul DNS spatiale étudié, les paramètres chimiques A et T_a qui interviennent dans le calcul du taux de réaction ont les valeurs adimensionnelles $A^+ = 2524.0$ et $T_a^+ = 66.67$. Ces valeurs ont été choisies pour que l'allumage et l'établissement de la flamme de diffusion aient lieu à l'intérieur du domaine de calcul.

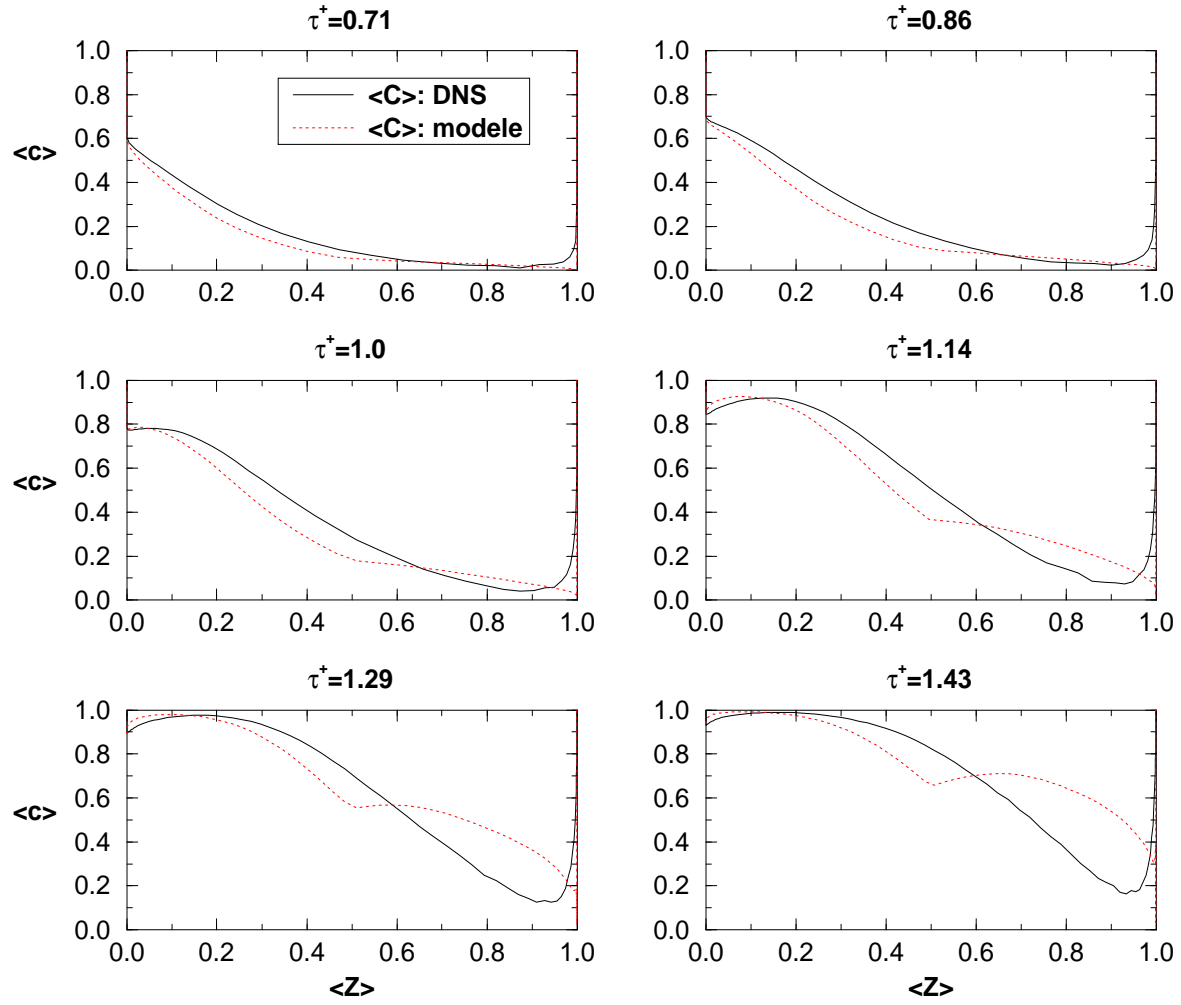


Figure 4.13 : Variation de la moyenne de la variable d'avancement calculée à partir de la DNS et modélisée au cours du temps adimensionnel en fonction de \bar{Z} . $Re_t = 104.6$.

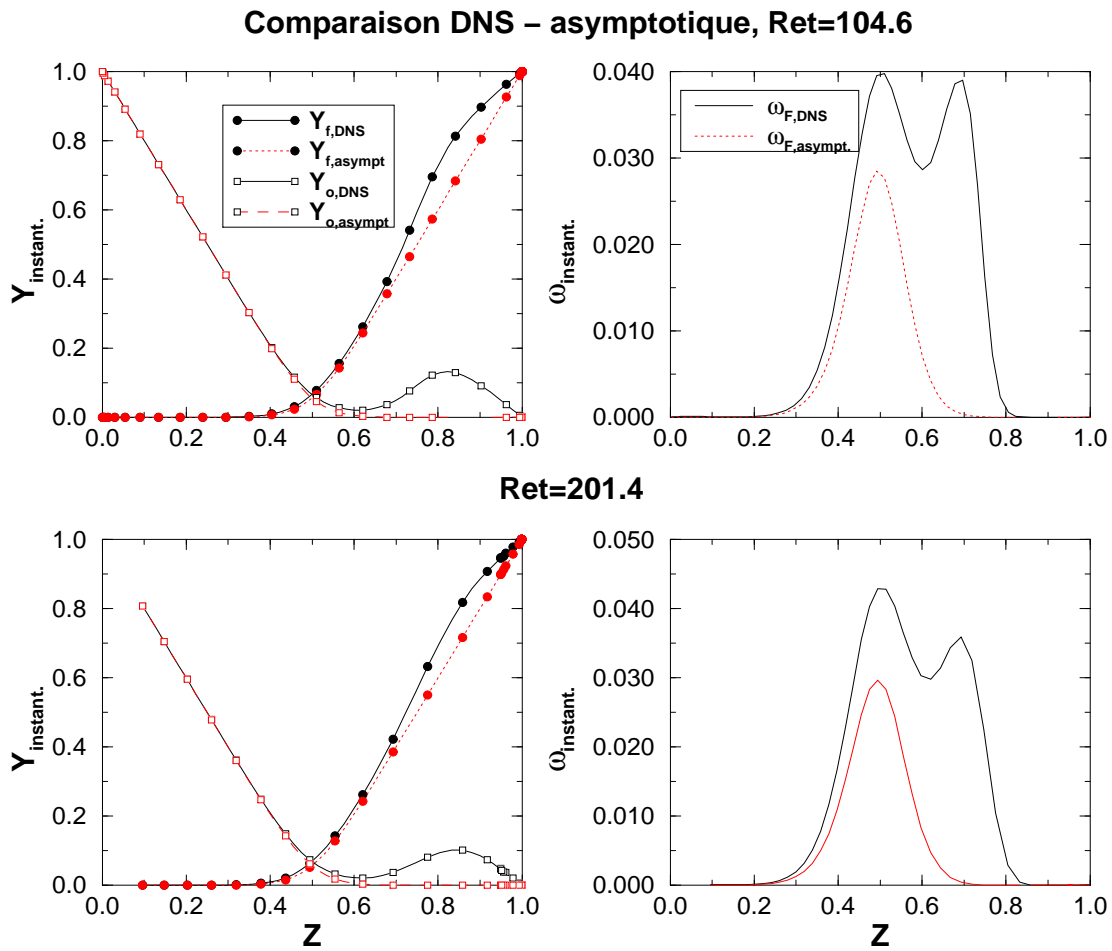


Figure 4.14 : Comparaison entre les mesures instantanées des Y_i et de ω_f à la sortie du domaine de calcul quand la flamme de diffusion est établie et les prévisions de la théorie asymptotique de Liñan. $Re_t = 104.6$ et $Re_t = 201.4$.

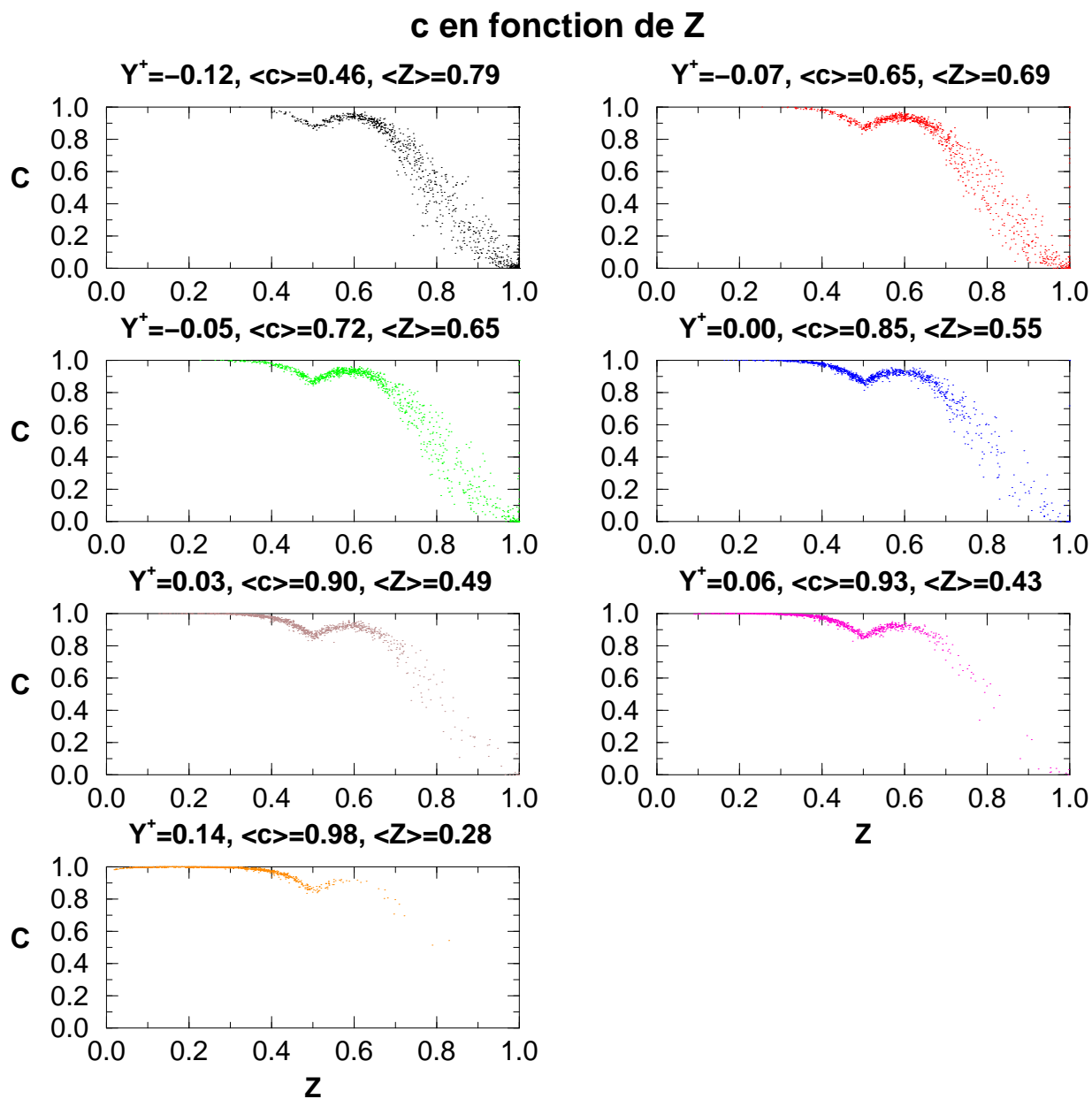


Figure 4.15 : Représentation en nuage de points de l'évolution de c en fonction de Z pendant les différentes réalisations du calcul DNS. Profil $\tau^+ = 1.57, Re_t = 104.6$.

Nous avons ensuite supposé que les fonctions densité de probabilité de c et de Z ne sont pas corrélées et que $P(c) = \delta(c - \bar{c})$. Cette dernière hypothèse a été testée à travers le calcul des *pdf* de c pour plusieurs points sur deux profils du calcul à $\tau^+ = 0.5$ (pendant l'auto-inflammation) et à $\tau^+ = 1.57$ (établissement de la flamme de diffusion). Pour chaque profil, y^+ varie entre -0.12 et 0.34 . Les résultats de la figure 4.16 montrent qu'à $\tau^+ = 0.5$, même si pour certains points, les *pdf* de c ne sont pas tout à fait des Dirac, elles restent tout de même des fonctions à un seul pic centré sur la valeur moyenne et dont la variance est faible. A $\tau^+ = 1.57$, les *pdf* présentent un pic autour de $c = 0.9$ dû, une fois de plus, au fait que $Y_{F,eq}$ ait été calculé dans le cas d'une chimie infiniment rapide (cf. la figure 4.15 où, à $\tau^+ = 1.57$ une grande densité de points avec $c < 1$ apparaît autour de $Z = Z_{st}$).

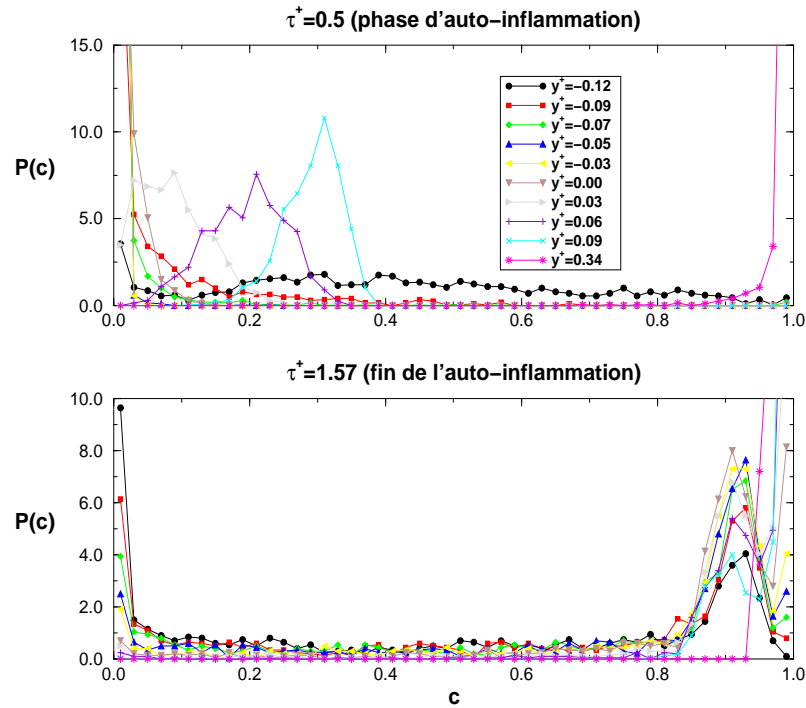


Figure 4.16 : Fonctions densité de probabilité de c pour deux profils de calcul au début et à la fin de l'auto-inflammation, $Re_t = 104.6$.

Concernant les fonctions densité de probabilité de la fraction de mélange, nous nous attendons à que l'extension de l'approche *pdf* présumées à partir de fonctions β (approche validée dans le cas du mélange non réactif) soit aussi valable dans le cas d'un écoulement réactif. La figure 4.17 montre que même si l'accord n'est pas aussi bon que dans l'écoulement thermodiffusif (figure 4.10), la forme de $P(Z)$ n'est pas très éloignée d'une fonction β (équation 2.34) dont les paramètres a et b sont calculés par les équations 2.35 et 2.36 à partir des valeurs locales de \bar{Z} et de $\overline{Z'^2}$.

4.4.2 Résultats obtenus avec le modèle PDFA

Le taux de réaction moyen modélisé avec le modèle PDFA est ici comparé aux valeurs calculées à partir des simulations numériques directes de couche de mélange spatiale. Les valeurs obtenues

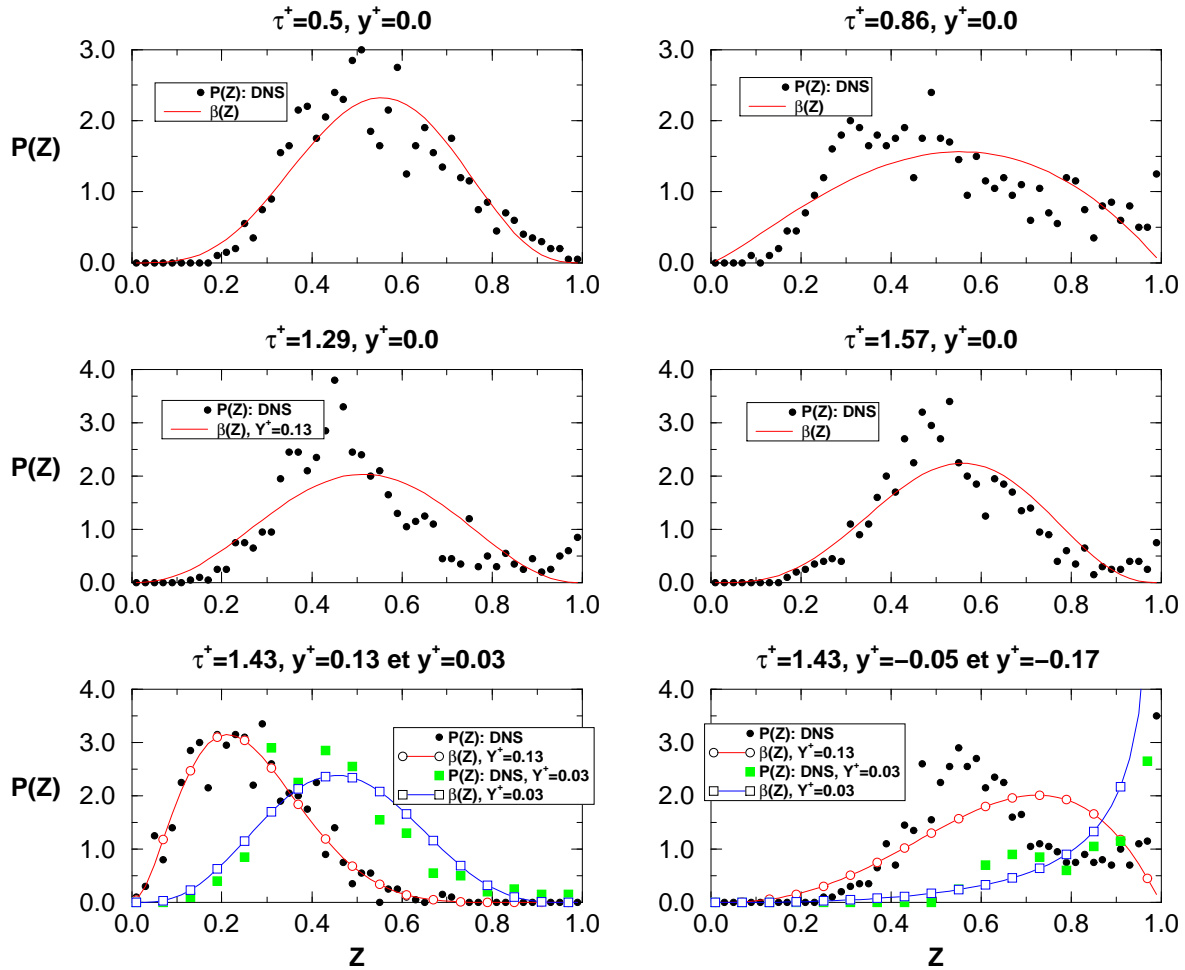


Figure 4.17 : Fonctions densité de probabilité de Z pour des différents profils de calcul. Comparaison entre les *pdf* calculées en DNS et les *pdf* présumées à partir d'une fonction β , $Re_t = 104.6$.

en DNS sont représentées sur la figure 4.18. Cette figure montre l'évolution avec x^+ du taux de réaction moyen intégré le long de la direction perpendiculaire à la direction de l'écoulement moyen et l'évolution de la température moyenne sur la surface iso- Z , $Z = Z_{st}$. Les trois cas turbulents présentés sont décrits dans la section 4.2 Le taux de réaction modélisé est ensuite comparé au taux de réaction moyen calculé en DNS dans le cas $Re_t = 104.6$ (figure 4.19).

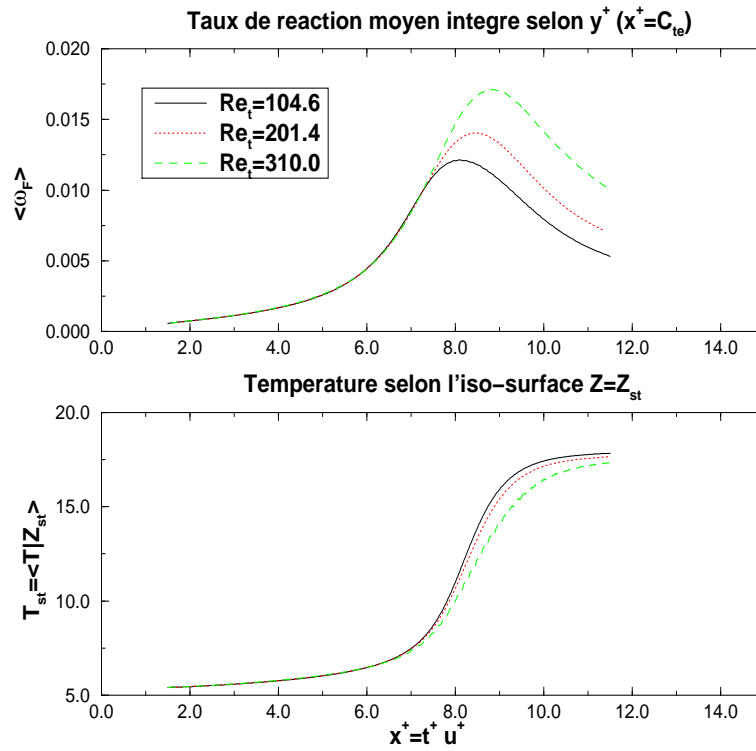


Figure 4.18 : Evolution du taux de réaction moyen et de la température moyenne mesurés en DNS dans la direction de l'écoulement moyen.

Un mot doit être dit sur le choix de la représentation des résultats du taux de réaction. Souvent, le paramètre d'auto-inflammation est la première apparition d'une région où le taux de réaction monte soudainement. Ce point peut être identifié avec l'observation visuelle d'une première flamme. Mais ce qui est mesuré dans la chambre de combustion d'un moteur n'est pas le délai relatif à la première apparition d'auto-inflammation, mais le délai concernant le taux de réaction moyen dans la chambre de combustion (en général calculé à partir des mesures de pression moyenne). Dans ce cas, l'instant d'auto-inflammation est déterminé plutôt par la propagation de la flamme juste après l'allumage, lorsque le taux de réaction moyenné sur la chambre devient important. Cette valeur est naturellement plus grande que la première. Nous avons choisi cette dernière façon de présenter l'auto-inflammation. Une moyenne basée sur le domaine de calcul équivaut dans la configuration DNS utilisée à déterminer la moyenne du taux de réaction selon la direction perpendiculaire à l'écoulement moyen.

Les courbes $\bar{\omega}_F$ de la figure 4.18 sont représentatives des mécanismes d'auto-inflammation et d'établissement d'une flamme de diffusion. Une première période est caractérisée par un taux de réaction pratiquement nul, où une faible consommation des réactifs et une faible augmentation de la température sont observées. Pendant cette période, les réactifs sont en

train d'être mélangés. Dans une deuxième phase, en raison du caractère exponentiel du taux de réaction, celui-ci monte de façon très rapide jusqu'à une consommation presque totale des réactifs prémélangés pendant le délai d'auto-allumage. Finalement, une flamme de diffusion apparaît et le taux de réaction diminue.

Les résultats issus du modèle d'auto-allumage PDFa (équation 3.23 où $Y_{F,eq}$ dans l'expression de \bar{c} est calculée à l'aide de l'équation 3.41) sont comparés aux calculs DNS décrits dans la section 4.2. Le cas turbulent numéro 2 ($Re_t = 104.6$) a été choisi pour illustrer les résultats obtenus, bien que le modèle ait aussi été appliqué aux deux autres cas turbulents. Qualitativement, les conclusions obtenues sont indépendantes du niveau de turbulence.

Le taux de réaction modélisé, calculé par l'équation 3.23 (courbe interrompue de la figure 4.19) suit bien le taux de réaction réel jusqu'au moment où ce dernier atteint sa valeur maximale. A ce moment, le modèle commence à surestimer le taux de réaction calculé en DNS et la réduction observée due à la consommation des réactifs ne s'amorce pas.

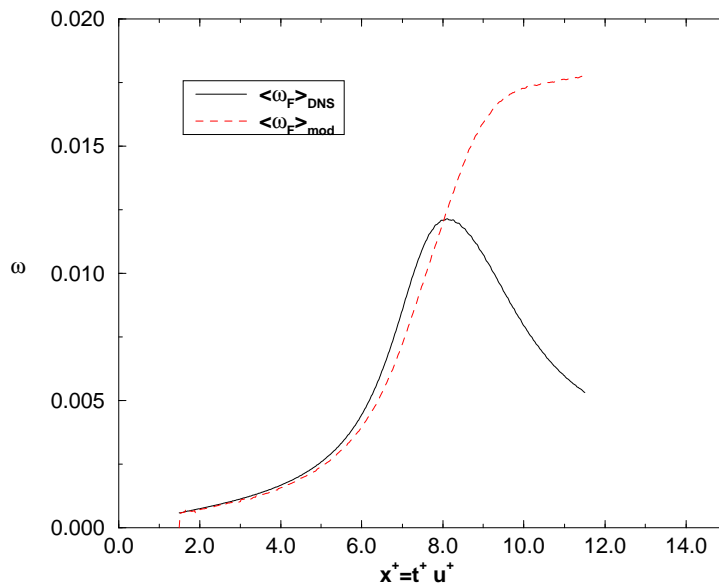


Figure 4.19 : Comparaison entre les taux de réaction moyens intégrés selon y^+ calculés par la DNS et modélisé (modèle PDFa), $Re_t = 104.6$.

La figure 4.20 montre les valeurs du taux de réaction mesuré en DNS et calculé par le modèle PDFa sur chaque point de l'écoulement. La surestimation du taux de réaction à partir du moment où sa valeur maximale est obtenue est évidente. Nous pouvons aussi observer sur cette figure la capacité du modèle à reproduire le calcul DNS pendant tout le processus d'auto-allumage (localisation en fonction de la fraction de mélange représentée par des iso-lignes et délai).

Pour mieux comprendre les raisons du non fonctionnement du modèle PDFa pendant la période d'établissement de la flamme de diffusion, nous avons effectué des tests de vérification

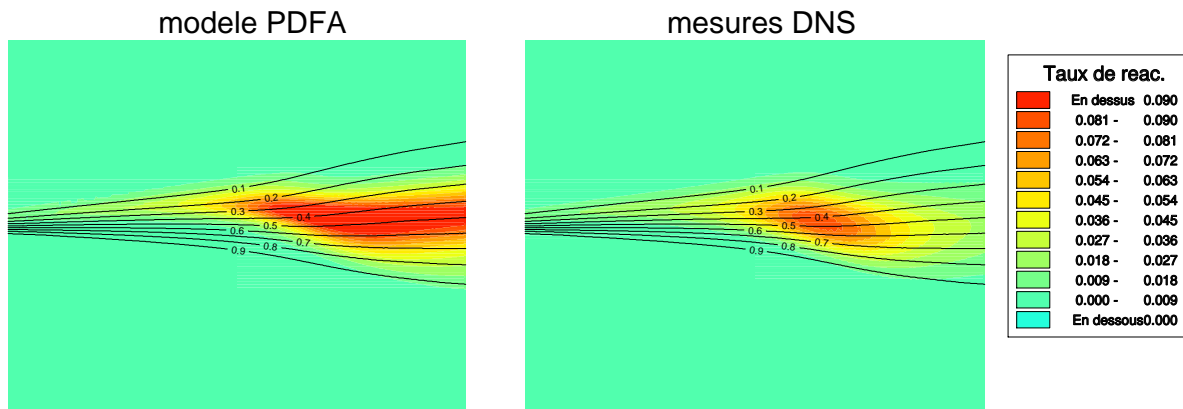


Figure 4.20 : Comparaison entre les taux de réaction moyens calculés par le modèle PDFa et issus de la DNS. Les iso-lignes de la fraction de mélange sont aussi représentées. $Re_t = 104.6$.

des différentes hypothèses simplificatrices utilisées dans le calcul du taux de réaction moyen. Nous rappelons ces hypothèses:

- Le taux de réaction peut être exprimé en fonction de deux variables, Z qui tient compte de l'état du mélange des réactifs et c qui comptabilise quelle fraction des réactifs mélangés a été consommée.
- Les fonctions densité de probabilité de Z et de c nécessaires à la détermination du taux de réaction moyen ne sont pas corrélées et peuvent être présumées à partir d'expressions analytiques (fonctions β et fonctions de Dirac, respectivement).
- La température et les concentrations massiques de réactifs tendent vers les valeurs asymptotiques données par les expressions 3.35, 3.41 et 3.42 respectivement, quand la flamme de diffusion s'établit.
- Les fractions massiques Y_i et la température T peuvent être exprimées en fonction de Z et de c à partir de l'intégration des expressions 3.25 et 3.26, pondérées par $P(Z)$.

Comme nous avons vu dans la section 3.3.2, la première hypothèse est fondée sur des considérations physiques, caractéristiques de la dynamique du système étudié. Nous avons en effet vérifié que le taux de réaction instantané (équation 3.15) était correctement calculé en remplaçant dans cette équation les Y_i , Y_j et T par leurs expressions modélisées 3.25 et 3.26.

La deuxième hypothèse a été testée dans la section 4.4.1. En ce qui concerne la variable c , la figure 4.16 a montré que sa distribution n'est jamais très loin de la fonction de Dirac $\delta(c - \bar{c})$. La forme de la *pdf* présumée de Z n'est pas loin non plus de la réalité. Lorsque la flamme est allumée, la fonction $\beta(\bar{Z}, \bar{Z}^2)$ sous-estime de façon systématique les valeurs de *pdf* mesurées. Ceci est dû probablement à l'expansion thermique résultant de la forte augmentation de la température. Cependant, la forme des courbes ainsi que leurs ordres de grandeur restent cohérents. D'ailleurs, la sous-estimation des *pdf* n'aiderait qu'à faire descendre le taux de réaction modélisé. Il est aussi important de noter que le taux de réaction moyen a aussi été calculé à partir de *pdf* présumées issues des moyennes de Favre $\beta(\bar{Z}, \bar{Z}^2)$. Cette approche,

proposée par Bilger [16], est justifiée par le fait que l'écoulement se déroule à densité variable. Les résultats obtenus avec les moyennes de Favre sont les mêmes que ceux obtenus à partir des moyennes de Reynolds.

Sur la figure 4.14, des valeurs instantanées des Y_i et du taux de réaction, mesurées à la sortie du domaine de calcul, et des valeurs calculées à partir de la théorie asymptotique de Liñan, ont été comparées. L'accord entre les deux formulations n'est pas tout à fait obtenu. Ceci est probablement expliqué par le fait que la flamme de diffusion n'est pas encore définitivement établie à la fin du domaine de calcul DNS.

Pour évaluer la dernière hypothèse, il faut vérifier d'abord la méthode d'intégration numérique utilisée. Il s'agit d'une règle de Simpson adaptative dans le sens où le nombre de points d'intégration dépend de la raideur de la fonction intégrée. Les tests effectués sont de nature purement numérique et pour cela, ils sont inclus dans l'annexe D.

Ensuite, nous nous reportons à l'analyse des figures 4.21 et 4.22. Sur ces deux figures sont représentées les différentes grandeurs qui interviennent dans le calcul de $\bar{\omega}$ aux instants $\tau^+ = 0.71$ (pendant l'auto-inflammation) et $\tau^+ = 1.57$ (fin de l'auto-inflammation) respectivement. Il s'agit des concentrations des deux réactifs et de la température. Les profils de la variable d'avancement et du taux de réaction sont également représentés.

La figure 4.21 montre que pendant la phase d'auto-inflammation, il existe un bon accord entre les profils des concentrations moyennes de F et de O et de la température moyenne calculées en DNS et leurs modèles (PDFA). $Y_{i,mod}$ et T_{mod} sont calculées à partir de $P(Z)$ associée aux expressions 3.25 et 3.26 à travers les équations 3.30 et 3.31 respectivement. T_{eq} , $Y_{F,eq}$ et $Y_{O,eq}$ sont calculées à partir des équations 3.35, 3.41 et 3.42 respectivement. Le seul écart non négligeable entre la DNS et les modèles existe autour de $Z = 1$. Ceci est dû au fait que $P(Z)$ tend vers des valeurs infinies lorsque Z s'approche de 1 dans les régions de l'écoulement proche de la source de carburant (figure 4.17 pour $\tau^+ = 1.43$ et $y^+ = -0.17$). La variable d'avancement modélisée présente aussi un bon accord avec sa valeur calculée en DNS. En conséquence, le profil du taux de réaction modélisé est proche du profil mesuré.

Au contraire de ce qui se passe pendant la phase d'auto-allumage, lorsque la température devient élevée et s'approche de la température d'équilibre de la flamme, le bon accord entre les taux de réaction réel et modélisé vérifié auparavant disparaît. En observant les concentrations et la température modélisées pour $\tau^+ = 1.57$ (figure 4.22), nous constatons que l'accord avec les quantités moyennes issues de la DNS n'est pas aussi satisfaisant qu'avant l'auto-inflammation. L'erreur relative à $Z = 0.5$ (Z_{st}) commise par le modèle de calcul de la concentration de chacun des réactifs est d'environ 25%. En ce qui concerne la température, cette erreur n'excède pas 10%. Les écarts observés ne semblent pas a priori justifier le rapport d'environ 3 à $Z = 0.5$ existant entre les taux de réaction réel et modélisé.

Le manque de précision du modèle du taux de réaction doit alors pouvoir s'expliquer autrement. En effet, même si les expressions 3.25 et 3.26 reproduisent de manière acceptable $Y_i(Z)$ et $T(Z)$, il est bien connu que le taux de réaction moyen est plus délicat à obtenir avec une méthode de *pdf* quand les fronts sont raides, ce qui est le cas après l'allumage. En effet, dès que les gradients des concentrations et de la température deviennent importants, des petites erreurs d'estimation des *pdf* peuvent s'accumuler et rendre faux le résultat final.

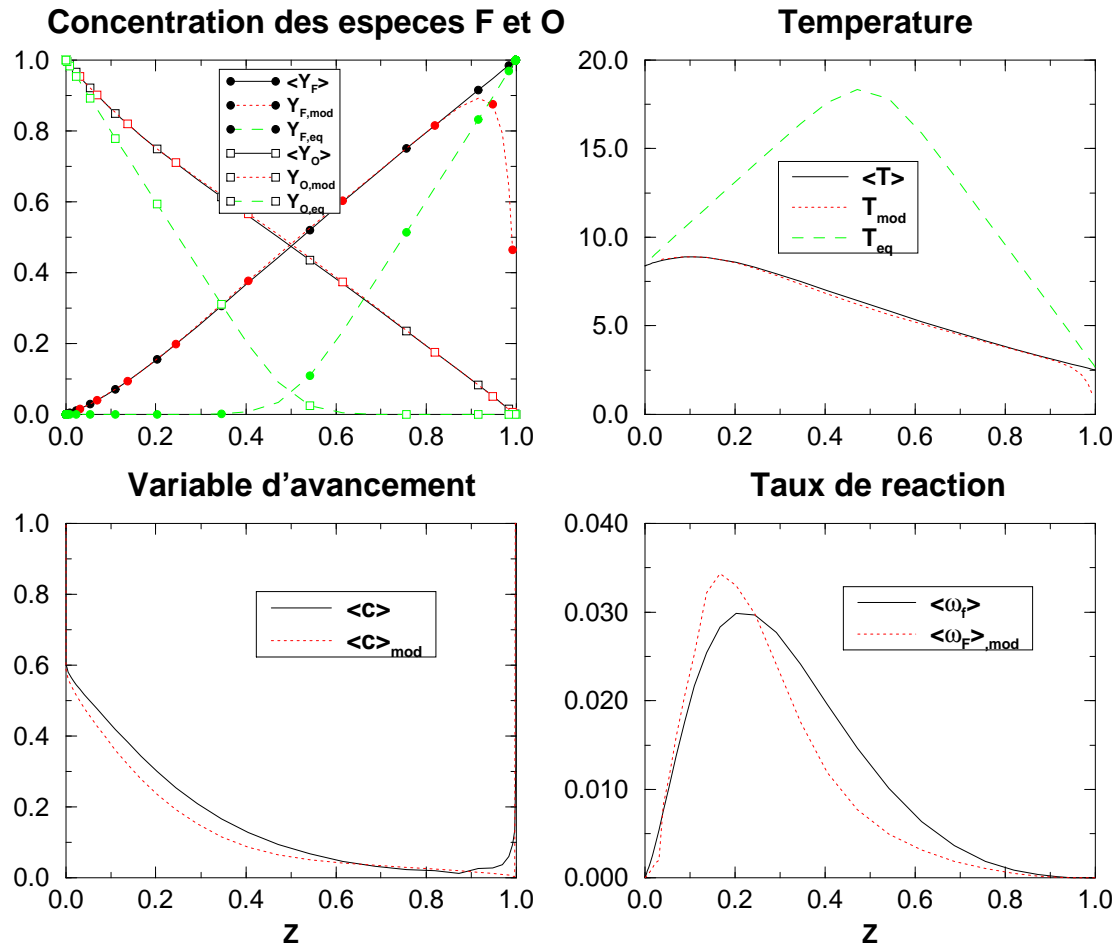


Figure 4.21 : Profils des grandeurs intervenant dans le calcul du taux de réaction, variable d'avancement et taux de réaction à $\tau^+ = 0.71$, $Re_t = 104.6$.

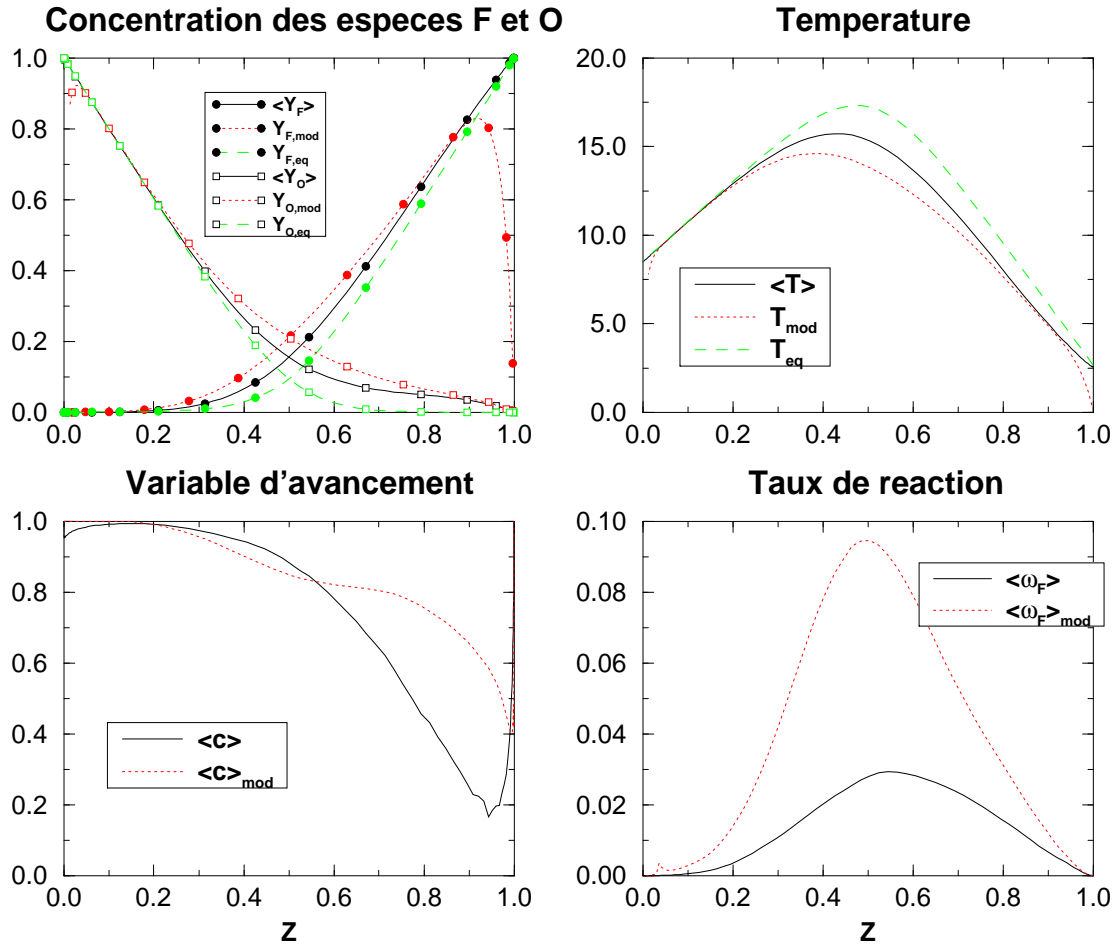


Figure 4.22 : Profils des grandeurs intervenant dans le calcul du taux de réaction, variable d'avancement et taux de réaction à $\tau^+ = 1.57$, $Re_t = 104.6$.

Le prémélange $\overline{Y_F Y_O}$, défini dans la section 3.2, qui intervient directement dans le calcul du taux de réaction a été calculé et comparé aux résultats des mesures.

$$\overline{Y_F Y_O} = \int_0^1 Y_F(\bar{c}, Z) Y_O(\bar{c}, Z) P(Z) dZ \quad (4.8)$$

La figure 4.23 montre l'écart important entre les résultats produits par le modèle PDFa et par les calculs DNS concernant $\overline{Y_F Y_O}$. Cet écart est de l'ordre de 3 au voisinage de $Z = Z_{st} = 0.5$, là où se produit la combustion ce qui explique les erreurs observées sur le taux de réaction moyen. A titre de vérification, la figure 4.23 présente aussi les rapports $\frac{\overline{Y_F Y_O}|_{mod}}{\overline{Y_F Y_O}|_{DNS}}$ et $\frac{\bar{\omega}|_{mod}}{\bar{\omega}|_{DNS}}$. Ces rapports sont du même ordre et confirment que l'erreur sur $\bar{\omega}$ provient d'une erreur sur $\overline{Y_F Y_O}$. La sous-estimation de la température moyenne, qui aurait plutôt la tendance à faire baisser le taux de réaction, n'a donc aucune influence sur le calcul de $\bar{\omega}_F$.

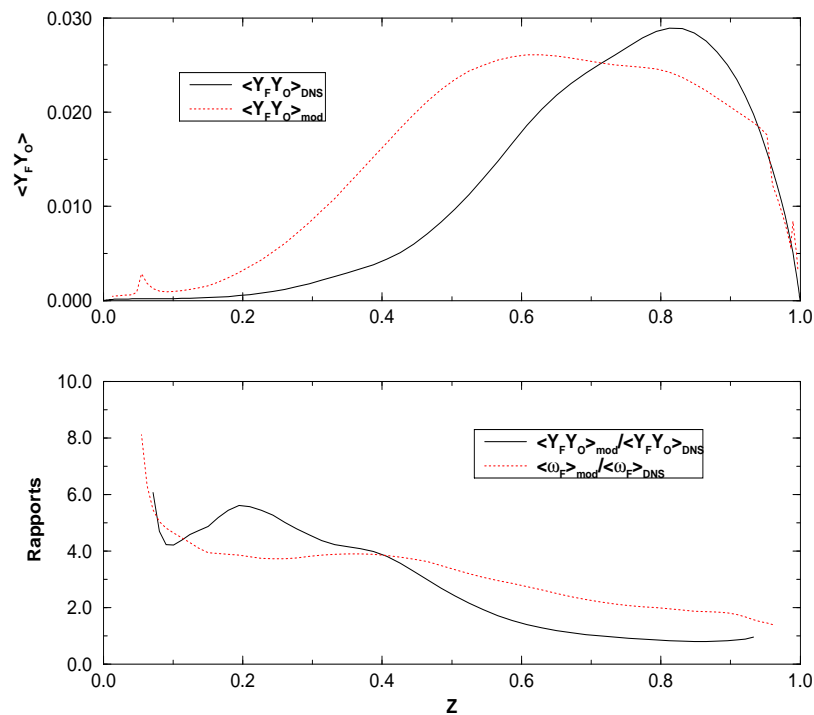


Figure 4.23 : Comparaison entre $\overline{Y_F Y_O}$ mesurée en DNS et modélisée (modèle PDFa). Rapport entre les deux grandeurs. Corrélation entre ce rapport et le rapport des taux de réaction mesuré en DNS et modélisé, $\tau^+ = 1.57$, $Re_t = 104.6$.

4.4.3 Résultats obtenus avec le modèle CHI

Comme prévu lors de la formulation du modèle PDFa dans le chapitre précédent, celui-ci n'arrive pas à reproduire la transition vers la situation de flamme de diffusion établie. Un modèle de flamme de diffusion fondé sur le concept de flammelettes a donc été proposé de manière à combler cette difficulté (équation 2.60).

$$\bar{\omega}_F = \frac{1}{2} \bar{\rho}_{st} \tilde{\chi}_{st} \frac{Y_{F,0}}{1 - Z_{st}} P(Z_{st})$$

La solution de l'équation 2.60, reproduite ci-dessus, peut être directement comparée avec les résultats issus de la DNS car $\bar{\rho}_{st}$ et $\tilde{\chi}_{st}$ sont des grandeurs mesurables. Au contraire, dans un code moyen, ces grandeurs ne sont pas directement disponibles et doivent être modélisées. L'approche la plus simple consiste à dire que les grandeurs locales caractéristiques de la flamme peuvent être confondues avec leurs valeurs moyennes respectives. Peters [22] propose des relations algébriques entre les moyennes globales et les moyennes conditionnées de la dissipation scalaire.

Dans la figure 4.24 l'évolution des taux de réaction moyens mesurés en DNS et calculés avec les modèles PDFA et CHI est représentée. Le modèle PDFA simule bien l'auto-inflammation et le modèle CHI s'approche des résultats obtenus près de la sortie du domaine de calcul. Il sous-estime naturellement le taux de réaction mesuré en DNS car, il faut le rappeler, le modèle CHI considère que la chimie est infiniment rapide. Comme il a déjà été vu précédemment, ceci n'est pas le cas dans la configuration étudiée. L'hypothèse que le modèle global de combustion Diesel doit correspondre à une pondération entre le modèle PDFA et CHI semble se confirmer par observation de la figure 4.24.

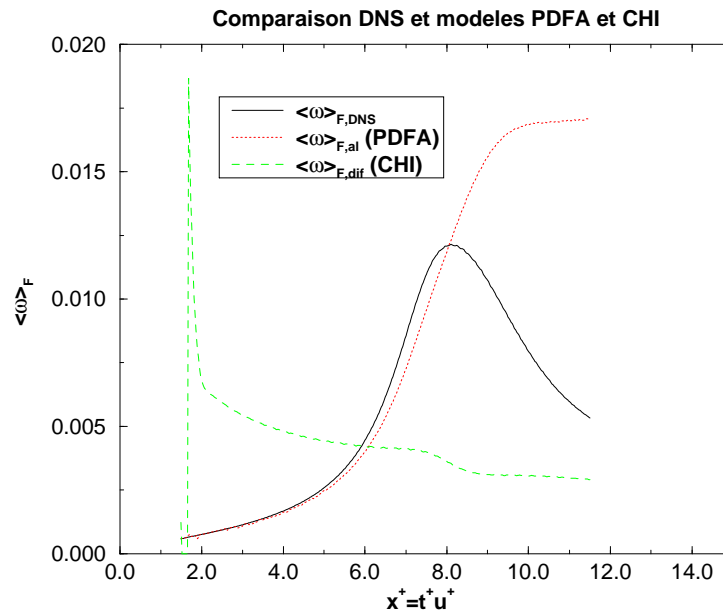


Figure 4.24 : Evolution des taux de réaction moyens mesurés en DNS et calculés avec les modèles PDFA et CHI. $Re_t = 104.6$.

4.4.4 Détermination de la fonction de pondération PDFA/CHI

Nous avons vu que le modèle PDFA décrivait correctement le mélange et l'auto-allumage mais pas les phases suivantes. Nous avons aussi identifié la source de ce problème: Les forts gradients rencontrés en flamme de diffusion établie rendent la méthode *pdf* imprécise. Par contre, le modèle CHI est valable dans cette phase. Il est donc logique de les coupler. Une fonction de pondération $f(\bar{c})$ dont le paramètre est la moyenne de la variable d'avancement est alors calculée. Le comportement de $f(\bar{c})$ doit être semblable à celui de \bar{c} . Au début du processus

d'auto-inflammation, la fonction f doit tendre de manière asymptotique vers 0 et lorsque la flamme de diffusion est établie, f doit s'approcher de 1.

Les tests qui ont été effectués par rapport aux résultats de la DNS ont montré que dans cette configuration, la fonction qui correspond à la meilleure pondération entre les modèles PDFA et CHI est $f(\bar{c}) = \bar{c}^3$. La formulation du modèle PDFA/CHI est donc dans ce cas,

$$\bar{\omega}_F = (1 - \bar{c}^3) \bar{\omega}_{F,al} + \bar{c}^3 \bar{\omega}_{F,dif} \quad (4.9)$$

D'autres fonctions $f(\bar{c})$ ont été testées. Les résultats de cette analyse sont présentés dans l'annexe E.

Le taux de réaction global, issu du modèle PDFA/CHI est présenté sur la figure 4.25 et comparé aux mesures DNS. Nous pouvons observer un meilleur accord entre les mesures DNS et les calculs qu'avec le modèle PDFA simple (figure 4.20).

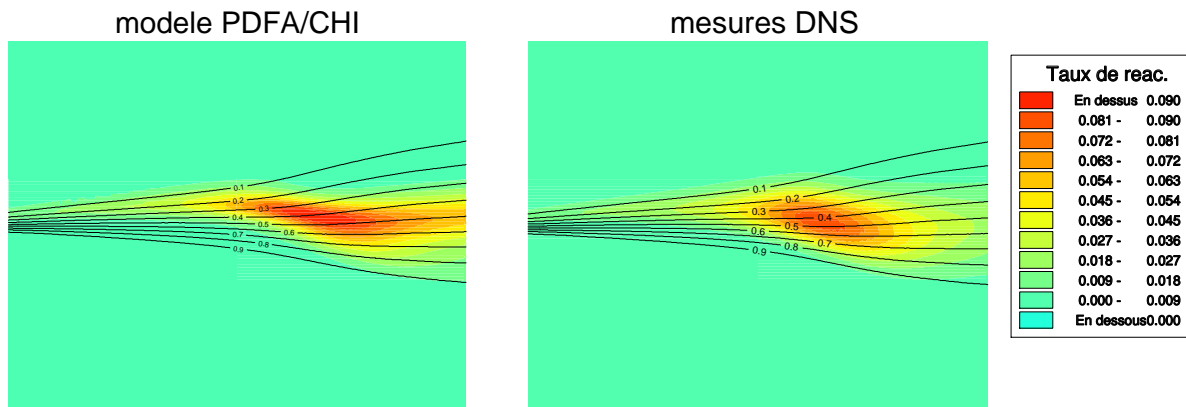


Figure 4.25 : Comparaison entre les taux de réaction moyens calculés par le modèle PDFA/CHI et issus de la DNS. Les iso-lignes de la fraction de mélange sont aussi représentées. La fonction de pondération est $f(\bar{c}) = \bar{c}^3$. $Re_t = 104.6$.

4.5 Modèle PDFA/CHI: Tests sur couche de mélange temporelle

Dans la section 4.2, il a été remarqué que les écoulements turbulents caractéristiques des simulations spatiales de Van Kalmthout interviennent peu sur la structure interne des zones de mélange. Cette structure interne reste presque laminaire, même si elle est fortement plissée (figure 4.1).

L'influence de la turbulence à l'intérieur de la couche de mélange va être étudiée à l'aide de l'analyse de la base de données DNS relative au calcul d'une couche de mélange temporelle. Les caractéristiques de cette simulation ont été décrites dans la section 4.2.2. Dans le cas où l'influence de la turbulence est importante, il est probable que le modèle PDFA/CHI puisse reproduire les différences de comportement issues de différents niveaux d'intensité de la turbulence.

La chimie, comme dans le cas de la couche de mélange spatiale, est représentée par une réaction d'ordre 1 (équation 3.15 avec $A = 1.0 \times 10^6$ et $T_a = 120.0$). A nouveau, nous ne nous intéressons qu'à l'influence de la turbulence sur les caractéristiques du mélange pendant l'auto-inflammation, ainsi qu'à la dynamique de la flamme au sein de l'écoulement turbulent.

La figure 4.26 montre, dans le cas de la simulation temporelle, le taux de réaction moyen et ses fluctuations, conditionnés selon la valeur de la fraction de mélange, avant et après l'auto-inflammation. Il est clair que dans cette simulation, la turbulence joue un rôle prépondérant. Dans les calculs de couche de mélange spatiale, les fluctuations du taux de réaction, conditionnées selon Z , étaient plusieurs ordres de grandeur en dessous des valeurs moyennes.

En comparant le taux de réaction moyen en fonction du temps calculé en DNS et calculé avec le modèle PDFA/CHI (figure 4.27), nous observons que l'accord reste toujours bon pendant la période d'auto-inflammation. A nouveau, avec le modèle PDFA/CHI, le taux de réaction est surestimé dès que la flamme de diffusion commence à s'établir. Cependant, ce qui est important dans cette comparaison est la constatation que le modèle PDFA/CHI, même dans une situation très turbulente, reproduit correctement l'auto-inflammation.

La figure 4.27 donne aussi une image du taux de réaction moyen calculé avec l'expression d'Arrhenius ne faisant intervenir que des valeurs moyennes (équation 3.24). La mauvaise description de l'auto-inflammation est dans ce cas très claire. Le processus démarre plus tôt et le taux de réaction atteint très rapidement des valeurs très élevées. Ceci démontre l'importance de la prise en compte de l'influence du champ turbulent sur le déroulement de l'auto-inflammation.

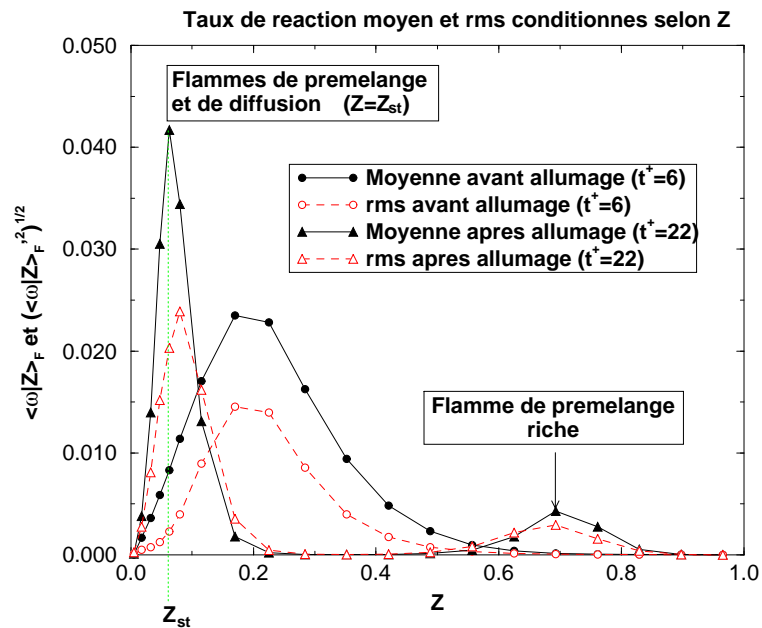


Figure 4.26 : Taux de réaction moyen et ses fluctuations conditionnées selon les valeurs de Z (simulation temporelle). Des courbes avant et après l’auto-inflammation sont tracées. Nous pouvons observer l’importance relative de la valeur *rms* du taux de réaction par rapport à la valeur moyenne.

4.6 Discussion et développement

Un modèle de mélange et d’auto-inflammation fondé sur une approche *pdf* présumées a été proposé et étudié. Les tests effectués par rapport aux résultats DNS montrent que le modèle se comporte bien durant l’auto-inflammation et une partie de la combustion prémélangée qui suit. Le taux de réaction moyen est surestimé lors de l’établissement de la flamme de diffusion. Pendant cette période, le front de flamme devient alors très fin et le modèle à *pdf* devient très sensible à la manière dont les variables de l’écoulement (les Y_i et T) sont calculées en fonction de \bar{c} et de Z . Un modèle de flamme de diffusion, ainsi qu’un couplage entre la combustion basse et haute température sont proposés pour remédier à ce problème (modèle PDFa/CHI).

4.6.1 Validité des simulations DNS utilisées

Concernant les simulations numériques directes utilisées, certains aspects capables d’influencer les résultats obtenus dans la section 4.4 doivent être soulignés. Un des handicaps importants de la DNS est la difficulté de garder un niveau de turbulence constant pendant le calcul. Typiquement, après l’initialisation d’un champ turbulent dans le domaine, l’intensité turbulente décroît au cours du temps. D’autant plus, que lorsque des réactions chimiques de combustion avec fort dégagement de chaleur ont lieu, la viscosité laminaire augmente. L’écoulement tend alors à se “laminariser”.

Un des moyens de résoudre ce problème est l’injection de turbulence dans le domaine de calcul. Un champ turbulent est initialisé dans un domaine virtuel, vérifiant l’équation de conservation de la masse. La turbulence ainsi générée, est injectée au fur et à mesure dans

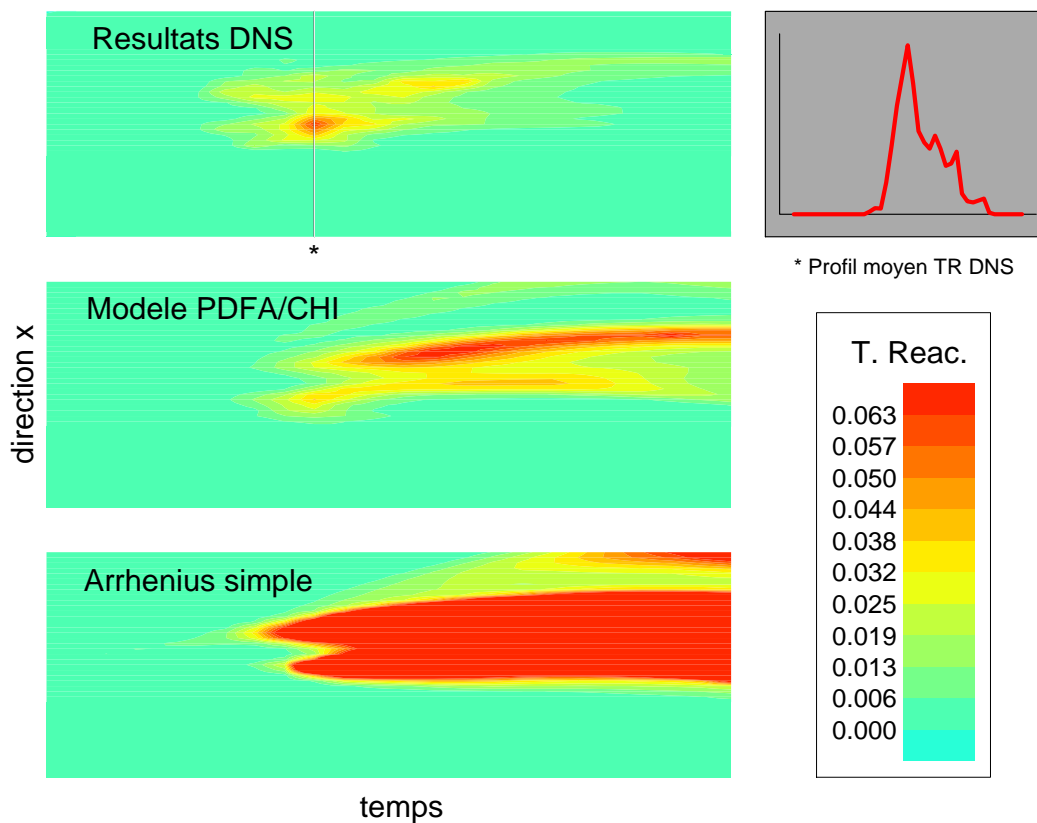


Figure 4.27 : Taux de réaction moyen: Calcul DNS; modèle PDFA/CHI; expression d'Arrhenius avec des valeurs moyennes. Chaque tranche de temps correspond à un instant de calcul. Les résultats DNS présentés sont obtenus en moyennant le taux de réaction selon la direction y^+ à l'instant choisi. Le résultat à chaque pas de temps est semblable au profil de taux de réaction moyen présenté.

le domaine réel, où toutes les équations de conservation sont résolues. La durée du calcul est proportionnelle à la longueur du domaine virtuel. Le problème de cette approche est le fait que toutes les perturbations qui apparaissent peuvent remonter l'écoulement et ainsi interférer avec le champ turbulent créé. Van Kalmthout a essayé de surmonter cette difficulté en injectant la turbulence par moyen d'un écoulement supersonique [68]. La durée de la simulation est alors contrainte par la vitesse très élevée de l'écoulement. Le délai d'auto-allumage de la couche de mélange doit être suffisamment petit pour que la flamme ait le temps de s'établir dans les limites du domaine de calcul. Ce délai est imposé par la valeur du nombre de Damköhler, qui a un rapport direct avec la constante pré-exponentielle dans le terme d'Arrhenius (équation 3.15).

Un autre problème, cette fois ci de nature numérique, est la difficulté des codes de calcul à traiter des gradients infinis et donc, d'initialiser le champ de mélange $\overline{Y_F Y_O}$ avec une valeur nulle. Ce serait la situation idéale, car un des objectifs de ce travail est précisément l'analyse de la turbulence sur la formation du mélange et en conséquence, sur les mécanismes d'auto-inflammation. Or, une valeur non nulle du terme $\overline{Y_F Y_O}$ au début du domaine implique l'existence d'un mélange initial.

Nous venons de voir que dans les simulations de Van Kalmthout, d'un côté le délai d'auto-allumage doit être très court et de l'autre côté, les calculs démarrent d'une situation où il existe déjà du mélange entre le carburant et l'oxydant. Ce mélange est calculé à partir de la solution des équations de transport des espèces F et O pour un écoulement laminaire, unidimensionnel sans réaction chimique (équations 4.1). En conséquence, le carburant et l'oxydant sont complètement mélangés à l'entrée du domaine de calcul. Comme le délai d'auto-allumage est court, l'écoulement turbulent n'a pas le temps d'agir sur la zone de mélange. La structure de mélange est plissée et agitée par les gros tourbillons, mais la distance entre les iso-lignes de mélange reste pratiquement inchangée. Sur la figure 4.28, les évolutions des taux de réaction moyens, conditionnés par rapport à la fraction de mélange stoechiométrique, sont tracées pour les trois niveaux de turbulence étudiés ($Re_t = 100, 200$ et 300). La coïncidence du délai d'auto-allumage caractéristique des trois courbes suggère que la turbulence n'a pas eu le temps d'agir sur la structure interne du mélange, modifiant ainsi le délai. L'évolution du taux de réaction pour $Z = Z_{st}$, caractéristique de l'écoulement laminaire correspondant (non montré sur la figure), coïncide aussi avec les évolutions turbulentes tracées. Ceci confirme le fait que l'interaction entre la turbulence et la structure interne de la zone de mélange est négligeable pendant la période avant l'auto-inflammation.

Il est important de noter que ce problème ne met pas en question les conclusions obtenues dans la section 4.4 à propos des performances du modèle PDFa et de la validité de ses hypothèses. Il s'agit bien d'un écoulement turbulent, qui permet l'analyse de l'interaction entre les structures turbulentes et la flamme.

4.6.2 D'autres restrictions liées aux calculs DNS

Malgré leurs différences, les simulations spatiale et temporelle ont des problèmes communs, caractéristiques des études DNS effectuées. Nous discutons ici les effets de l'utilisation d'un mécanisme chimique à une seule étape, ainsi que l'influence de l'absence de cisaillement moyen au sein de l'écoulement turbulent.

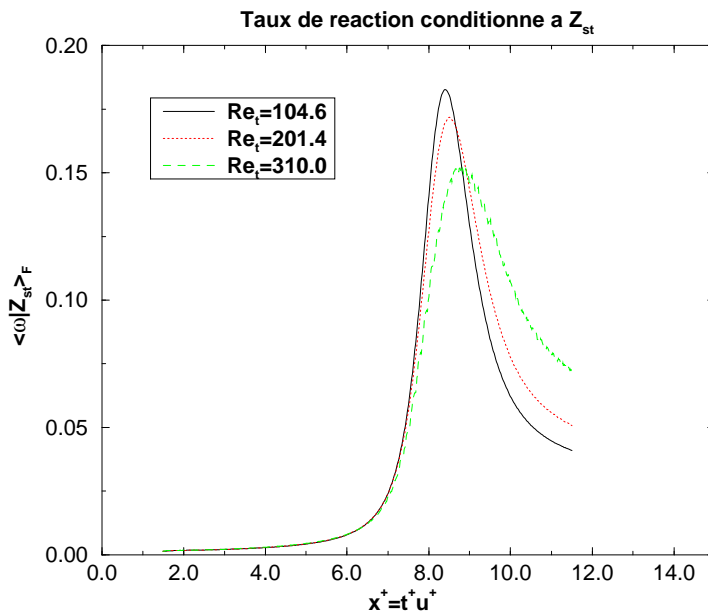


Figure 4.28 : Simulation spatiale. Taux de réaction moyen conditionné à $Z = Z_{st}$. Comparaison des évolutions pour différents niveaux de turbulence.

Chimie à une ou à plusieurs étapes

Beaucoup de questions se posent à propos de l'identification des effets dominants sur les mécanismes d'auto-inflammation. De nombreuses réactions chimiques ont lieu, faisant intervenir beaucoup d'espèces radicalaires intermédiaires. La présence des radicaux pour emballer la réaction est fondamentale. Un modèle qui envisage la reproduction fidèle et quantitative de l'auto-inflammation doit tenir compte de la chimie. Mais comme nous l'avons vu aussi dans la section 3.2, une réaction chimique ne peut avoir lieu que si les réactifs se trouvent mélangés. Or, dans un écoulement turbulent où le carburant et l'oxydant sont initialement séparés (comme dans un moteur Diesel), c'est la turbulence qui conditionne la formation du mélange. Les effets turbulents et les effets chimiques sont donc intrinsèquement liés lors de l'auto-inflammation.

Dans ce chapitre, nous avons essayé de quantifier les effets turbulents. Nous avons vu comment la turbulence agit lors de la formation du mélange réactif et ensuite, comment elle agit sur une flamme. Pour cela, l'utilisation de simulations dont la chimie se déroule en une seule étape est licite. Que ce soit avec une chimie à une ou à plusieurs étapes, la réaction n'a lieu qu'au sein de la partie mélangée des réactifs. Si le modèle proposé réussit à décrire l'allumage en chimie simple, nous pouvons alors envisager son extension en chimie complexe. De plus, la formulation *pdf* choisie est directement applicable à des mécanismes chimiques plus complexes. Ceci fait partie de son développement si l'objectif est l'application à des cas expérimentaux concrets.

Influence du cisaillement

Le cisaillement est une caractéristique importante d'un écoulement turbulent. L'étirement, dont nous avons discuté les effets sur une flamme dans la section 2.4, est le résultat sur la flamme

de l'action du cisaillement. Il est fortement incrémenté en présence des structures turbulentes. Le cisaillement constitue une source d'instabilités qui impliquent le passage de l'écoulement de la situation laminaire à la situation turbulente. Dans un moteur Diesel, quand le carburant est injecté dans la chambre de combustion à des vitesses très élevées, un fort cisaillement est généré. Il est responsable d'une partie importante de la turbulence présente dans la chambre.

Or, dans les simulations spatiale et temporelle, il n'y a pas de cisaillement moyen sur le front de flamme. Une partie importante de l'effet du champ turbulent sur la flamme est donc perdue. Cependant, même si le cisaillement moyen est nul, la flamme est toujours soumise à des étirements locaux importants, qui résultent des mouvements des différentes structures turbulentes. Sur la figure 4.3, nous observons que dès que la flamme de diffusion est établie, le taux de réaction est le plus fort dans les régions où l'étirement sur la flamme est le plus important. Des effets de cisaillement locaux importants peuvent donc être reproduits, même si en moyenne l'écoulement moyen relatif est nul entre le carburant et l'oxydant.

Chapitre 5

Intégration du modèle PDFA/CHI dans un code RANS 1D

5.1 Introduction

Grâce à la simulation numérique directe, nous avons pu étudier le processus d'allumage et d'établissement d'une flamme de diffusion au sein d'une couche de mélange turbulent. Un modèle de combustion Diesel a été proposé et ses résultats ont été testés par rapport à des calculs DNS.

La précision des calculs DNS est due d'un côté aux maillages très fins utilisés et d'un autre côté à l'utilisation de schémas numériques d'ordre élevé en temps et en espace. Avec des maillages fins, toutes les échelles spatiales de l'écoulement turbulent peuvent être traitées. L'application de la DNS à des géométries de taille réelle, ainsi qu'à des configurations physiques compliquées, intéressantes du point de vue industriel, est impossible. La résolution des équations moyennées qui décrivent le problème s'avère alors nécessaire, avec tous les efforts de modélisation que cela implique.

Dans un code de calcul de valeurs moyennes (que nous appelons RANS pour "Reynolds Averaged Navier Stokes"), des grandeurs comme la variance de la fraction de mélange, la dissipation scalaire moyenne et les grandeurs caractéristiques du front de flamme ne sont pas directement disponibles. Il faut, à partir des valeurs moyennes des variables de l'écoulement, modéliser les variables qui manquent. L'adaptation du modèle PDFA/CHI à un code RANS n'est donc pas immédiate.

Il faut dans un premier temps déterminer toutes les variables nécessaires à la résolution du problème. Ensuite, après l'implantation du modèle, il est important d'étudier son comportement numérique. Les problèmes de conditions initiales et de conditions limites liées aux grandeurs transportées par l'écoulement doivent être résolus. Enfin, les problèmes physiques caractéristiques des systèmes à étudier demandent une résolution cas par cas.

Ce chapitre est dédié à la description et à l'analyse de ces problèmes. Le modèle de combustion Diesel proposé est adapté et implanté dans le code RANS KIVA II MB [91, 92]. Le code KIVA II de Amsden *et al.* [91] résout les équations moyennées de Navier-Stokes, de conservation de la masse, de conservation de l'énergie et de conservation des espèces chimiques dans des écoulements tridimensionnels, non stationnaires, compressibles, turbulents et réactifs.

Les termes indéterminés dans les équations moyennes liés à la turbulence sont modélisés à partir du modèle $k - \epsilon$. Des équations de transport de l'énergie cinétique turbulente k et de son taux de dissipation ϵ sont résolues. Le code KIVA II est très bien adapté au calcul de géométries complexes avec des frontières mobiles (comme les chambres des moteurs à combustion interne). Habchi et Torres [92] ont introduit le traitement de maillage multi-blocs et des méthodes de relaxation du maillage. Le domaine de calcul peut ainsi être divisé en plusieurs modules élémentaires et les mouvements irréguliers de différentes mailles peuvent être gérés. Il est alors possible de réaliser des calculs d'écoulements dans les conduites d'admission et dans la chambre de combustion d'un moteur, avec des mouvements non simultanés des soupapes et du cylindre.

Dans ce chapitre, des tests sont réalisés sur une version unidimensionnelle du code, adaptée à l'étude paramétrique de modèles de combustion. Cette configuration permet de tester le modèle PDFA/CHI d'une façon proche de celle utilisée dans un calcul moteur tridimensionnel. Les équations de transport de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces chimiques sont résolues. La différence par rapport à son application dans une configuration réaliste est la non résolution des équations de transport de l'énergie cinétique turbulente et de son taux de dissipation. Dans le cas 1D, le modèle $k - \epsilon$ est utilisé, mais des valeurs de k et de ϵ constantes sont imposées le long du calcul.

Les pas donnés pour la modélisation du taux de réaction en fonction des différentes étapes suivies dans ce travail sont résumés dans le tableau 5.1.

	DNS	Modèle - DNS	Modèle - KIVA
$\tilde{Z}, \tilde{Z}''^2, \tilde{Y}_F$	Mesurées (moyennes)	Mesurées	Modélisées
\bar{c}	Calculée	Modélisée	Modélisée
$P(Z)$	Mesurée	Présumée	Présumée
$P(c)$	Mesurée	Présumée	Présumée
$Y_{F,eq}$	Mesurée	Calculée (analyse asymptotique Cuenot et Liñan)	Calculée (hypothèse de Burke-Schumann de chimie infiniment rapide)
$\bar{\omega}$	Mesuré	Modélisé	Modélisé
$f(\bar{c})$	Mesurée	Calculée par rapport à la DNS	Calculée en fonction de \bar{c}

Tableau 5.1 : Les différentes étapes de la modélisation du taux de réaction.

Dans ce tableau, les différentes variables qui interviennent dans le calcul du taux de réaction moyen sont représentées en fonction de l'outil utilisé pour sa détermination. Ainsi, la première colonne correspond aux calculs DNS présentés dans la section 4.2, la deuxième colonne correspond aux tests du modèle par rapport à la DNS (sections 4.4 et 4.5) et la troisième colonne indique comment dans ce chapitre les variables sont calculés dans le code KIVA. Dans ce dernier cas, il faut distinguer entre les tests 1D de ce chapitre et les tests 2D du chapitre suivant. Les tests 2D impliquent la résolution des équations de transport de k et de ϵ , tandis que pour les tests 1D, ces variables sont imposées et ne changent pas au long de l'écoulement.

5.2 Tests 1D

5.2.1 Description du problème

Le modèle PDFA/CHI a été implanté dans le code de calcul KIVA II MB. Il a été testé en fonction de paramètres chimiques, turbulents et numériques et son comportement a été comparé à celui du modèle de combustion Diesel modulaire traditionnel déjà implanté dans KIVA. Celui-ci contient un module d'auto-inflammation, actif jusqu'à une certaine valeur de la température moyenne, à partir de laquelle le modèle de Magnussen et Hjertager [71] est activé. Le modèle de Magnussen et Hjertager, décrit dans la section 2.4.4 permet le traitement de toute la phase de combustion à haute température avec l'établissement d'une flamme de diffusion turbulente. Ce modèle suppose que l'équilibre chimique existe et que la chimie est infiniment rapide.

Le modèle PDFA/CHI a d'abord été testé sur une configuration simple, unidimensionnelle. Il s'agit d'un écoulement de carburant et d'oxydant partiellement prémélangés, dont les concentrations de deux espèces se superposent sur une épaisseur $\delta_Z \ll L_x$, étant L_x la longueur du domaine unidimensionnel. La vitesse moyenne de l'écoulement est nulle. Les profils initiaux de carburant et d'oxydant résultent de la résolution de l'équation 3.14 non moyennée (écoulement laminaire), sans terme source dû à la réaction chimique et sans terme de convection (deuxième terme du coté gauche). Les conditions limites sont: $x \rightarrow -\infty, Y_F = 1, Y_O = 0$; $x \rightarrow +\infty, Y_F = 0, Y_O = 1$. Le temps t_0 auquel la solution de l'équation 3.14 est calculée, correspondant à l'épaisseur δ_Z , est petit par rapport aux échelles de temps caractéristiques du problème. Les résultats de cette opération sont présentés sur la figure 5.1.

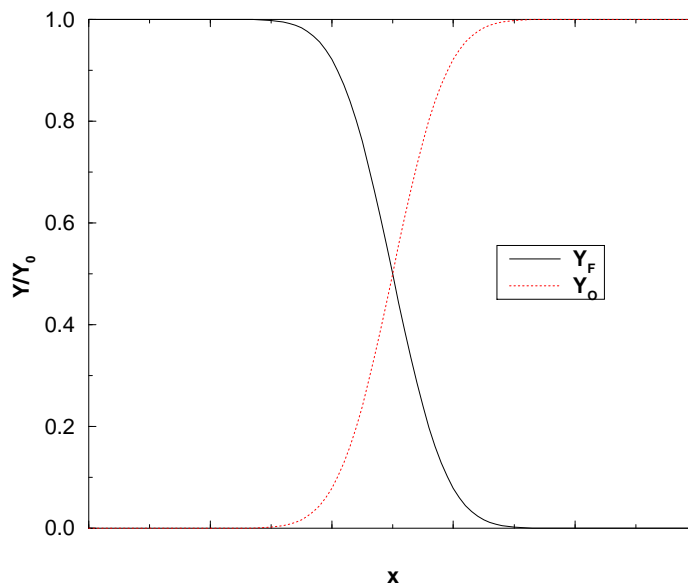


Figure 5.1 : Profils initiaux de Y_F et de Y_O . Résultat de la résolution de l'équation de transport diffusif ($D = D_i$) de Y_F et de Y_O après un certain temps t petit. $x \rightarrow -\infty, Y_F = 1, Y_O = 0$; $x \rightarrow +\infty, Y_F = 0, Y_O = 1$.

Le profil initial de température est calculé en fonction des températures limites et des concentrations de F et de O (équation 3.27). La température initiale de l'oxydant est supérieure à la température du carburant. Les ordres de grandeur sont typiques de la chambre de combustion d'un moteur Diesel: Température du carburant $T_{F,0} = 300.0K$ et température de l'oxydant $T_{O,0} = 1000.0K$. Le combustible utilisé est le n-heptane (C_7H_{16}) et l'oxydant est l'oxygène de l'air. Les concentrations limites de carburant et d'oxydant sont respectivement, $Y_{F,0} = 1.0$ et $Y_{O,0} = 0.233$. Le domaine unidimensionnel de calcul a une longueur $L_x = 1.0cm^1$.

Le code KIVA résout numériquement les équations instationnaires de conservation de la masse, de la quantité de mouvement, de l'énergie et des espèces chimiques à densité variable. La méthode numérique utilisée est la méthode des volumes finis. Dans la version 1D utilisé ici, le niveau de turbulence est imposé comme une constante. Les effets de la turbulence ont donc été simulés en imposant un coefficient de diffusion turbulent D_t constant dans le temps, calculé en fonction des valeurs souhaitées de l'énergie cinétique turbulente k et de la longueur intégrale l_t ,

$$D_t = \frac{C_\mu k^2}{S_c \epsilon} \quad (5.1)$$

où $S_c = 1$, $C_\mu = 0.09$ et ϵ (taux de dissipation de l'énergie cinétique turbulente) est calculé par,

$$\epsilon = 0.42 \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l_t} \quad (5.2)$$

5.2.2 Sensibilité du modèle PDFa/CHI par rapport aux paramètres numériques et physiques

Dans un premier temps, le comportement du modèle a été évalué par rapport aux paramètres chimiques: Constante pré-exponentielle et température d'activation (équation 3.15). La valeur de la constante pré-exponentielle est directement liée au délai d'auto-allumage, puisqu'elle conditionne directement l'ordre de grandeur du taux de réaction. La température d'activation est liée au gradient du taux de réaction. Nous avons choisi la température d'activation à partir des valeurs données par Westbrook et Dryer [93] pour le mécanisme simplifié d'oxydation de l'heptane ($T_a = 15102K$). La constante pré-exponentielle a été choisie de manière à avoir des temps de calcul raisonnables ($A = 5.1 \times 10^{+9}s^{-1}$ par rapport à $A = 5.1 \times 10^{+11}s^{-1}$ de Westbrook et Dryer). La façon arbitraire dont ce dernier paramètre a été choisi est justifiée par le fait qu'aucune comparaison avec des résultats expérimentaux ne va être effectuée sur cette configuration. Il s'agit dans un premier temps d'une étude de sensibilité du modèle et non de sa validation. Il faut toutefois garder en mémoire que l'ordre de grandeur du délai d'auto-inflammation dans un moteur Diesel varie entre 1 et 2 ms. Westbrook et Dryer proposent aussi pour cette réaction une dépendance non linéaire du taux de réaction en fonction des concentrations d'oxydant et de carburant,

$$\dot{\omega}_i = \rho A Y_F^{n_F} Y_O^{n_O} \exp(-T_a/T) \quad (5.3)$$

où l'exposant $n_F = 0.25$ et l'exposant $n_O = 1.5$. La configuration chimique de base du problème 1D est résumée dans le tableau 5.2.

¹Toutes les dimensions en unités CGS (KIVA II MB)

A (s^{-1})	T_a (K)	n_F	n_O
$5.1 \times 10^{+9}$	15102	0.25	1.5

Tableau 5.2 : Paramètres chimiques de référence du cas 1D étudié.

Les tests paramétriques suivants ont été effectués sur la configuration 1D:

- Comportement numérique du modèle par rapport au pas de temps de calcul.
- Différentes possibilités pour initialiser \widetilde{Z}''^2 .
- Influence du nombre de mailles utilisées dans l'initialisation des profils de \widetilde{Y}_F et de \widetilde{Y}_O .
- Influence de la dissipation scalaire imposée.
- Modification des paramètres turbulents k et l_t , ce qui implique des changements du coefficient de diffusion turbulent, ainsi que de l'étirement modélisé ϵ/k .
- Comparaisons avec le modèle de combustion Diesel déjà implanté dans KIVA II MB (modèles de Zellat et Zeller [2] et de Magnussen et Hjertager [71]).

L'implantation du modèle PDFA/CHI dans un code de calcul moyen implique des modifications par rapport au modèle utilisé lors des études comparatives avec les résultats DNS. Ainsi, pour le calcul de la variable d'avancement, $Y_{F,eq}$ a été définie par rapport à une chimie infiniment rapide (équation 3.19). Les équations 3.25 et 3.26 sont résolues avec une chimie infiniment rapide. Ces hypothèses ont été validées en traçant les profils de \widetilde{Y}_F et de \widetilde{Y}_O en fonction de Z . Dans les configurations étudiées, ils s'approchent en effet des profils correspondant aux solutions avec chimie infiniment rapide (figure 5.2).

Sensibilité par rapport au pas de temps de calcul

L'influence du pas de temps de calcul Δt sur le modèle PDFA/CHI a été étudiée. Les résultats (présentés sur la figure 5.3) ont montré que le pas de temps qui assure la convergence des calculs est $\Delta t = 1 \times 10^{-6}s$.

Sensibilité par rapport au nombre de mailles utilisées pour décrire le gradient initial de \widetilde{Z}

Comme nous l'avons vu dans la section 4.6.1, la description de gradients infinis par des codes de calcul présente des difficultés. L'étude d'un problème de mélange entre deux espèces implique donc en début de calcul l'imposition de gradients de concentration finis sur leur interface. Il ne faut cependant pas que le nombre points utilisés pour décrire ces gradients influence le résultat du calcul. Dans la configuration 1D, nous allons étudier si en changeant le nombre de mailles utilisé pour décrire le gradient initial de \widetilde{Z} , le problème converge vers une solution unique.

Le gradient initial de la fraction de mélange résulte de la solution de l'équation de transport de \widetilde{Z} (équation 2.10 moyennée) en régime instationnaire, sans terme de convection et avec un coefficient de diffusion égal au coefficient de diffusion turbulente, caractéristique du problème

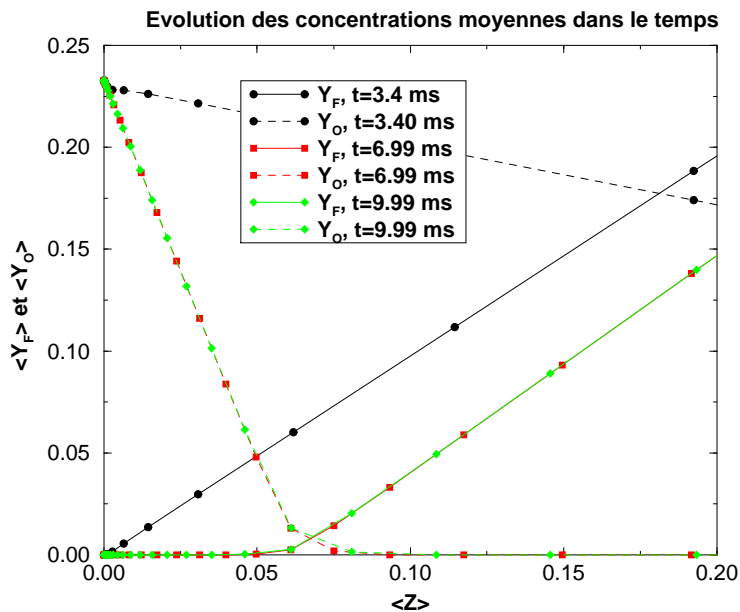


Figure 5.2 : Evolution des profils de concentration de carburant et d'oxydant dans les conditions de référence du calcul unidimensionnel (tableaux 5.3 et 5.2).

1D étudié. La solution est prise à un instant $t = t_0$ inférieur au temps chimique caractéristique du problème.²

Nous avons établi un profil initial de \tilde{Z} sur 20% de la longueur du domaine de calcul. Le nombre de mailles utilisé pour décrire le profil de variation de \tilde{Z} , nous l'appelons δ_Z . En gardant un maillage toujours uniforme, des calculs ont été effectués avec 40, 50, 100 et 200 mailles dans le domaine (δ_Z respectivement égale à 8, 10, 20 et 40 mailles).

Sur la figure 5.4 sont représentés des profils de la variance de la fraction de mélange pour $t = t_0$ (en fonction de \tilde{Z}) et des évolutions dans le temps du taux de réaction global, pour les différentes valeurs de δ_Z . Dans tous les cas, la convergence a été obtenue avec $\delta_Z = 20$, même si l'erreur commise avec $\delta_Z = 10$ n'était pas très grande.

Initialisation de \widetilde{Z}''^2

La résolution de l'équation de transport de la variance de la fraction de mélange implique l'initialisation de cette grandeur en début de calcul. Il s'agit, comme nous allons voir, d'un des aspects problématiques de la modélisation basée sur le transport de ce paramètre.

La variance de la fraction de mélange doit être calculée de façon cohérente par rapport à l'initialisation du profil de fraction de mélange. Pour calculer sa valeur initiale, il aurait fallu connaître davantage l'état du mélange à l'instant initial de calcul. Or, ceci n'est pas possible, car nous ne pouvons pas résoudre analytiquement l'équation moyennée de transport de \widetilde{Z}''^2

²Selon Williams [18], le temps chimique de référence pour un système initialement non prémélangé dont l'oxydant est la source chaude est $\tau_{ref} = (AY_{F,0}Y_{O,0} \exp(-T_a/T_{O,0}))^{-1}$.

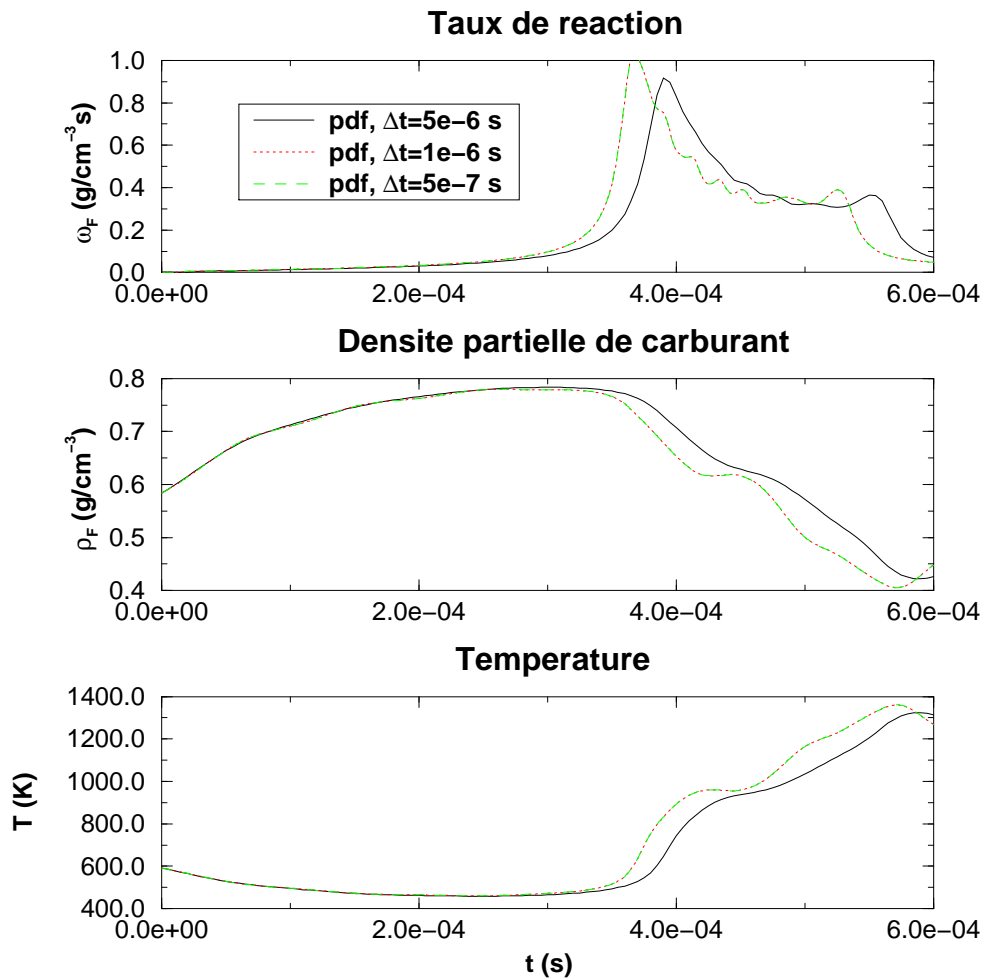


Figure 5.3 : Sensibilité du modèle PDFFA/CHI par rapport au pas de temps de calcul. La densité partielle de carburant et la température ont été suivies sur une maille au centre du domaine de calcul à environ $\tilde{Z} = 0.5$.

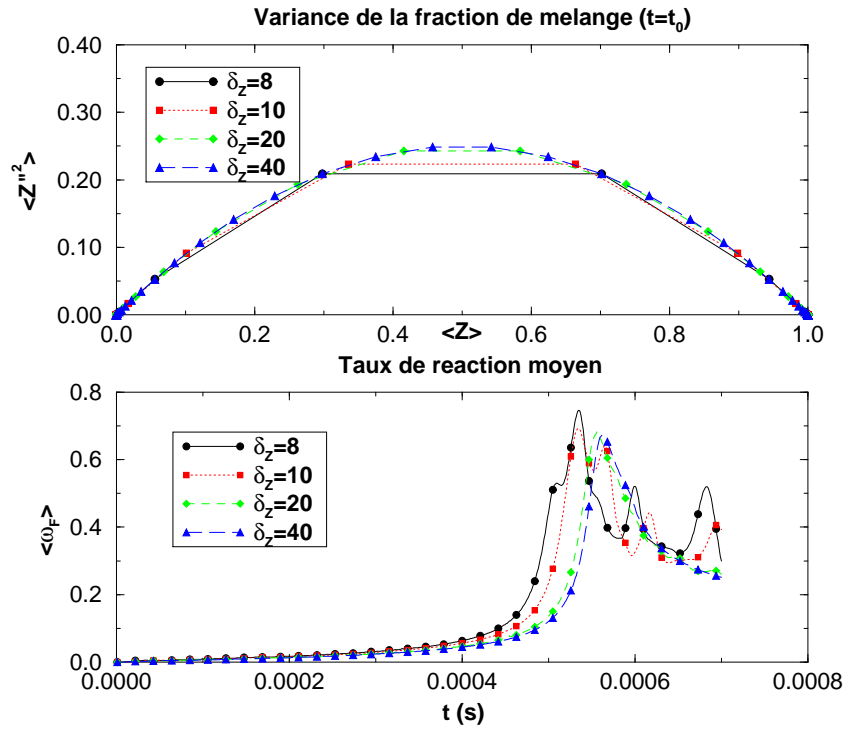


Figure 5.4 : Variance de la fraction de mélange pour $t = t_0$ et du taux de réaction moyen global, en fonction du nombre de mailles dans le profil initial de \tilde{Z} .

comme nous l'avons fait pour l'équation de transport de Z^3 . Nous savons seulement que $\widetilde{Z'^2}$ ne peut varier qu'entre deux bornes bien définies représentant chacune des situations physiques distinctes:

- La limite inférieure de $\widetilde{Z'^2}$ est la valeur nulle, ce qui implique que $Z(1-Z) = \tilde{Z}(1-\tilde{Z})$ et donc que partout où l'oxydant et le carburant sont en présence un de l'autre, ils sont parfaitement mélangés. Ceci correspond à la situation laminaire ce qui implique que la turbulence est dans ce cas négligée jusqu'au début de la simulation. C'est la situation étudiée dans la DNS.
- L'autre possibilité est d'attribuer à la variance initiale sa valeur maximale. Celle-ci est donnée par $\widetilde{Z'^2}_{max} = \tilde{Z}(1-\tilde{Z})$ ce qui est représentatif d'un écoulement intermittent entre deux espèces non mélangées. La diffusion laminaire est dans ce cas négligée devant les fluctuations de l'écoulement turbulent.

Comme il n'est pas possible de connaître, dans l'intervalle $[0, \tilde{Z}(1-\tilde{Z})]$, la valeur la plus adaptée au problème en étude, nous avons étudié les deux cas extrêmes.

Les résultats présentés sur la figure 5.5 montrent que le changement de $\widetilde{Z'^2}$ initiale ne modifie le comportement de l'auto-allumage que dans les cas où le mélange initial est nul (ou de façon équivalente, $\widetilde{Z'^2} = \tilde{Z}(1-\tilde{Z})$). En effet, quand le système part d'une configuration où F et

³Rappelons que le mélange non réactif peut être calculé par $Z(1-Z) = \tilde{Z}(1-\tilde{Z}) - \widetilde{Z'^2}$.

O sont pour $t = t_0$ complètement mélangés, la turbulence n'a pas le temps d'intervenir et par rapport au délai d'auto-allumage, tout se passe comme s'il s'agissait d'une configuration laminaire (aussi représentée sur la figure 5.5).

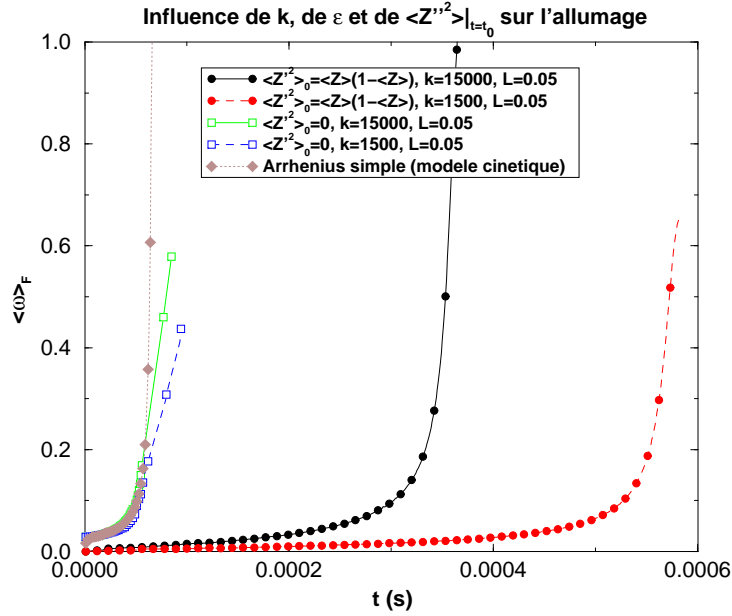


Figure 5.5 : Comportement du taux de réaction pendant la période d'auto-inflammation en fonction de l'initialisation de \widetilde{Z}''^2 et des paramètres turbulents. Comparaison avec un modèle d'auto-inflammation cinétique laminaire (Arrhenius 1 étape).

La question est donc de savoir laquelle des deux configurations est la plus réaliste dans un moteur. Sachant que la turbulence joue un rôle important dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel, il ne paraît pas logique de considérer $\widetilde{Z}''^2 = 0$ en début de calcul. Dans une moyenne cyclique, comme celle qui est effectuée dans KIVA II (les grandeurs moyennes sont calculées sur l'ensemble des cycles moteurs), il est plus facile d'admettre l'intermittence de la concentration des espèces cycle à cycle que son invariabilité totale. La solution $\widetilde{Z}''^2 = \widetilde{Z} (1 - \widetilde{Z})$ pour le temps de calcul $t = t_0$ a donc été choisie pour les calculs qui suivent.

Sensibilité par rapport aux grandeurs turbulentes k et l_t

Le tableau 5.3 présente la liste des différents cas étudiés. La longueur intégrale l_t est le paramètre qui distingue les deux premiers cas des trois suivants. Pour chaque longueur intégrale considérée, l'énergie cinétique turbulente k a été changée. Nous rappelons que les délais d'auto-inflammation obtenus ne concernent aucun problème réel. Ils doivent servir comme repère pour la comparaison entre les différents cas turbulents. L'instant d'auto-inflammation a été défini au moment où le taux de réaction atteint 10% de sa valeur maximale.

La figure 5.6 représente graphiquement l'évolution des taux de réaction dans tout le domaine de calcul au cours du temps, ainsi que les iso-lignes de fraction de mélange ($\widetilde{Z} = 0$ en haut et

cas	k (cm^2s^{-2})	l_t (cm)	ν_t (cm^2s^{-1})	ϵ/k (s^{-1})	Re_t	t_{ai} (ms)	$\tilde{\omega}_{F,max}$
1	1.5×10^4	0.05	1.31	1028	8.3	0.32	21.4
2	3.0×10^4	0.05	1.86	1455	11.7	0.26	24.0
3	3.0×10^3	0.1	1.17	230	7.4	0.66	13.1
4	3.0×10^4	0.1	3.71	727	23.5	0.41	19.3
5	1.0×10^5	0.1	6.77	1328	42.9	0.32	22.9

Tableau 5.3 : Les différents paramètres turbulents utilisés dans l'étude de sensibilité.

$\tilde{Z} = 1$ en bas). Chaque profil $t = C_{te}$ correspond au domaine unidimensionnel en étude. Dans tous les cas, la séquence d'événements ayant lieu est la même:

- Mélange entre le carburant et l'oxydant avec des taux de réactions faibles.
- Début de l'auto-allumage avec une zone plus au moins longue en fonction de la turbulence.
- Auto-allumage avec une hausse importante du taux de réaction.

La consommation des réactifs dans les points où l'auto-allumage s'est produit est presque totale. En conséquence, le taux de réaction devient à nouveau très faible dans cette région. La flamme se propage alors vers les zones prémélangées riche et pauvre en consommant ainsi tout le mélange créé auparavant. Finalement, une flamme de diffusion s'établit à $\tilde{Z} = Z_{st}$ (pour le mélange entre l'heptane et l'oxygène, dans les concentrations indiquées, $Z_{st} = 0.062$). La figure 5.7 montre l'évolution dans le temps du taux de réaction moyen intégré sur tout le domaine.

La sensibilité du modèle par rapport à la variation des grandeurs turbulentes est illustrée sur les différentes images et courbes des figures 5.6 et 5.7 respectivement. Les conséquences de la variation des paramètres turbulents se font sentir autant sur les délais d'auto-inflammation que sur la forme de la zone de réaction.

Le paramètre contrôlant directement le délai d'auto-inflammation est l'étirement ϵ/k (tableau 5.3): L'augmentation de l'étirement fait diminuer le délai d'auto-inflammation. Ceci peut être expliqué par le fait que l'augmentation de l'étirement implique l'augmentation de la dissipation scalaire moyenne et en conséquence, la diminution de la variance de la fraction de mélange. Or, la réduction de la variance de la fraction de mélange aboutit à une quantité de mélange plus importante et donc, des délais d'auto-allumage plus courts.

La forme de la zone de réaction est influencée par le niveau de diffusion turbulente. En augmentant celle-ci, le mélange est étalé dans le domaine, ce qui est confirmé par l'éloignement des iso-lignes de fraction de mélange. La comparaison entre les cas 1 et 2 et entre les cas 2 et 4 montre que le changement de l'énergie cinétique turbulente a un effet moins prononcé sur la largeur de la zone de réaction que celui de l'échelle intégrale. Ceci est expliqué par le fait que le coefficient de diffusion turbulent dépend linéairement de l'échelle intégrale, tandis que l'influence de l'énergie cinétique turbulente est en $k^{\frac{1}{2}}$,

$$D_t = \frac{C_\mu}{0.42Sc} k^{\frac{1}{2}} l_t \quad (5.4)$$

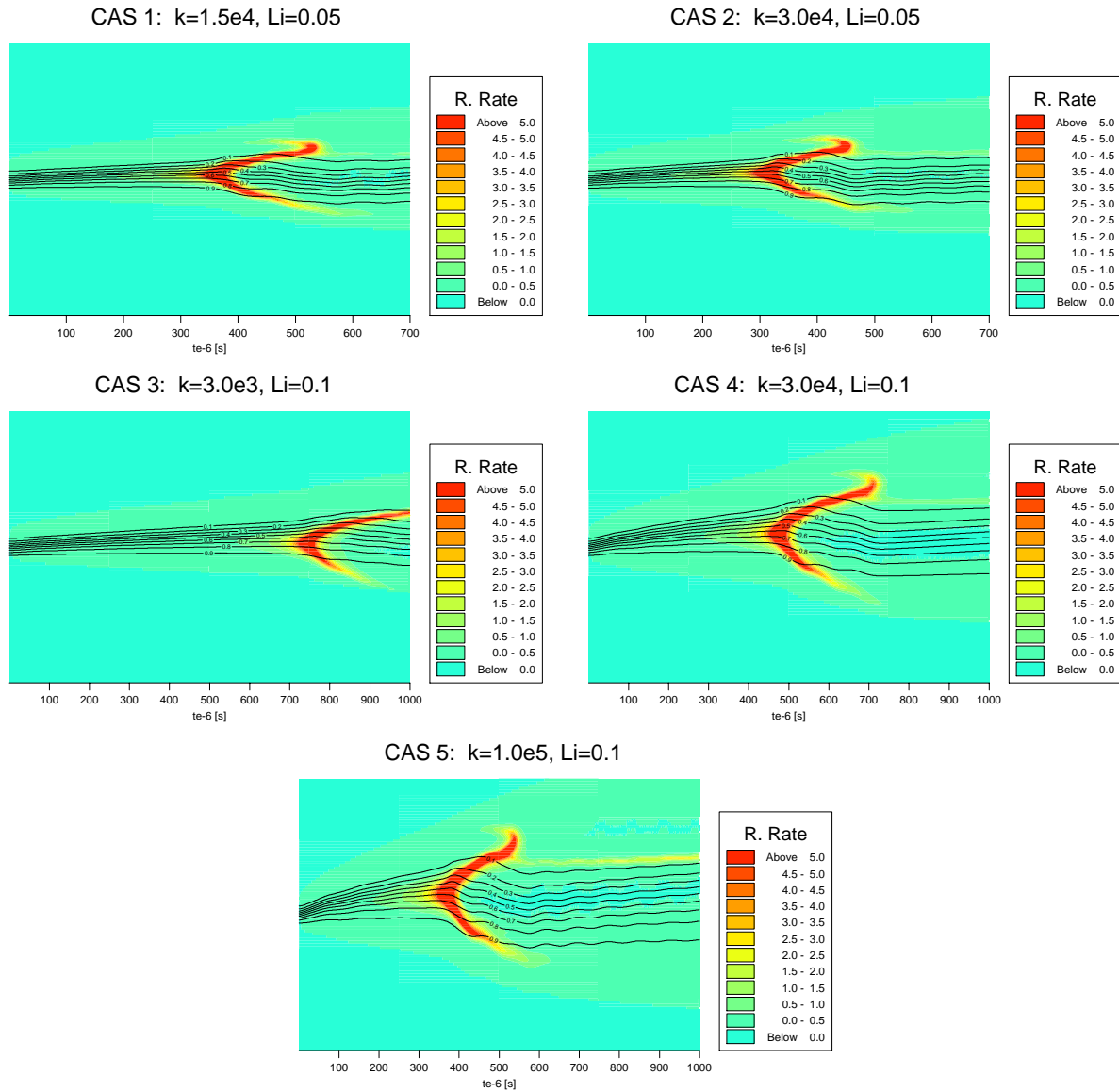


Figure 5.6 : Taux de réaction en fonction du temps, de la coordonnée x du domaine 1D, et des paramètres turbulents k et l_t . Les iso-lignes représentent la fraction de mélange moyenne \tilde{Z} .

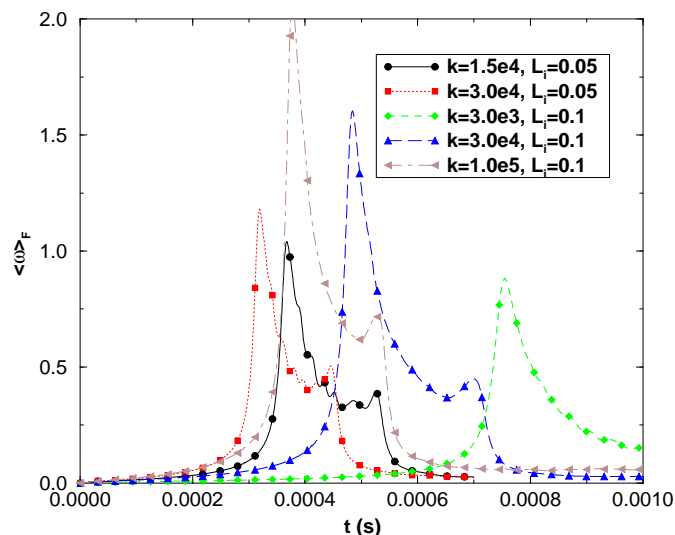


Figure 5.7 : Evolution au cours du temps du taux de réaction moyen, intégré sur le domaine de calcul dans les différents cas turbulents.

Cette même dépendance existe dans le calcul de l'étirement,

$$\frac{\epsilon}{k} = 0.42 \frac{k^{\frac{1}{2}}}{l_t} \quad (5.5)$$

La figure 5.6 montre que même si la localisation spatiale du point d'allumage varie, la flamme s'allume toujours pour des valeurs de \tilde{Z} proches de 0.5, indépendamment de la turbulence. Les travaux de Liñan [20], de Liñan et Crespo [4] et de Mastorakos *et al.* [3] montrent que pour des conditions limites de température et de concentration fixées, l'allumage a toujours lieu à une valeur de la fraction de mélange bien définie, la fraction de mélange la plus réactive Z_{mr} . Cependant, lorsque il s'agit de l'écoulement moyen, il est possible que la valeur moyenne de la fraction de mélange sur le point d'allumage ne soit pas Z_{mr} . La figure 5.8, qui montre l'évolution de la forme de $P(Z = Z_{st})^4$ au cours du temps, confirme que dans les instants initiaux du calcul, avant l'allumage, la probabilité de trouver $Z = Z_{st}$ est en effet maximale pour $\tilde{Z} = 0.5$. La flamme s'allume donc en moyenne à $\tilde{Z} = 0.5$.

Avec des modèles d'auto-inflammation cinétiques et laminares, du type Arrhenius simple, Zellat-Zeller [2] ou Shell [9], qui ne tiennent pas compte de la structure locale du mélange, l'allumage aura toujours lieu à $\tilde{Z} = Z_{mr}$.

5.2.3 Comparaison avec un modèle traditionnel

Les modèles utilisés pour les calculs du taux de réaction pendant la combustion dans un moteur Diesel sont des modèles cinétiques laminares pour l'auto-inflammation, couplés ensuite avec des modèles algébriques, où le mélange carburant-oxydant est consommé selon un temps

⁴Pour le heptane, Z_{st} et Z_{mr} sont très proches ($Z_{st} = 0.062$).

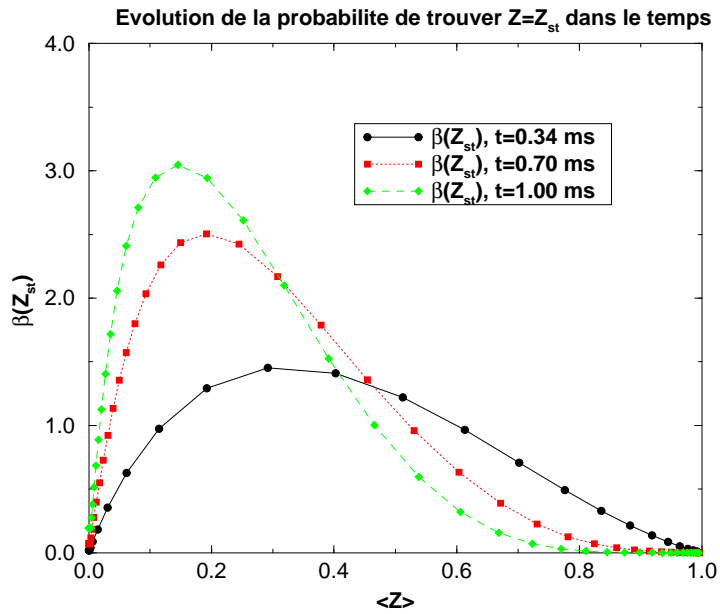


Figure 5.8 : Evolution au cours du temps de la probabilité de trouver $Z = Z_{st}$ en fonction de \bar{Z} . Configuration chimique du tableau 5.3 et turbulente du cas 1 du tableau 5.2.

caractéristique du système. Ce temps caractéristique peut être un temps turbulent comme k/ϵ (modèle de Magnussen et Hjertager [71]), ou la somme d'un temps chimique avec un temps turbulent (modèle de Kong *et al.* [74]). Dans KIVA II MB, le modèle d'auto-allumage est le modèle de Zellat-Zeller [2] et le modèle de combustion à haute température est le modèle de Magnussen et Hjertager.

Nous avons comparé les résultats obtenus avec le modèle PDFA/CHI et les résultats donnés par un modèle simplifié qui couple une expression d'Arrhenius simple (équation 5.3) pour l'auto-inflammation au modèle de Magnussen et Hjertager pour la combustion à haute température (équation 2.67),

$$\bar{\omega}_F = \bar{\rho} A \frac{\epsilon}{k} \min \left(\tilde{Y}_F, \frac{\tilde{Y}_O}{r}, B \frac{\tilde{Y}_P}{1+r} \right)$$

où A et B sont des constantes du modèle, r est le rapport stoechiométrique massique entre l'oxydant et le carburant et \tilde{Y}_P est la concentration massique des produits de la combustion (nous allons l'appeler par la suite, le modèle ARR/MAG). L'expression d'Arrhenius simple a été préférée par rapport au modèle de Zellat-Zeller car le modèle PDFA/CHI est basé sur un mécanisme de chimie simple. Le même schéma cinétique est ainsi utilisé dans les deux modèles. Les résultats sont présentés sur les figures 5.9 et 5.10.

Plusieurs différences de comportement sont observées entre les deux modèles:

- La continuité du taux de réaction dans le domaine entre les périodes d'allumage et d'établissement de la flamme de diffusion. La nature du modèle PDFA/CHI assure cette

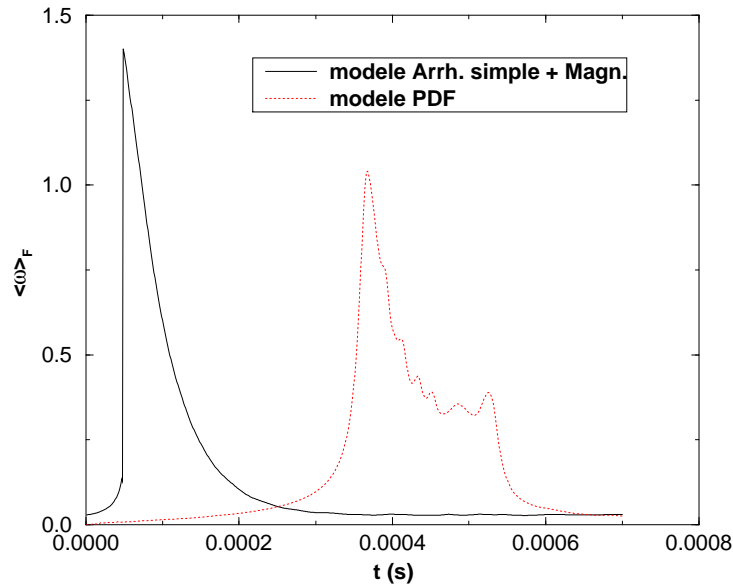


Figure 5.9 : Evolution au cours du temps du taux de réaction moyen, intégré sur le domaine de calcul. $k = 1.5e^4 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-2}$, $l_t = 0.05 \text{ cm}$.

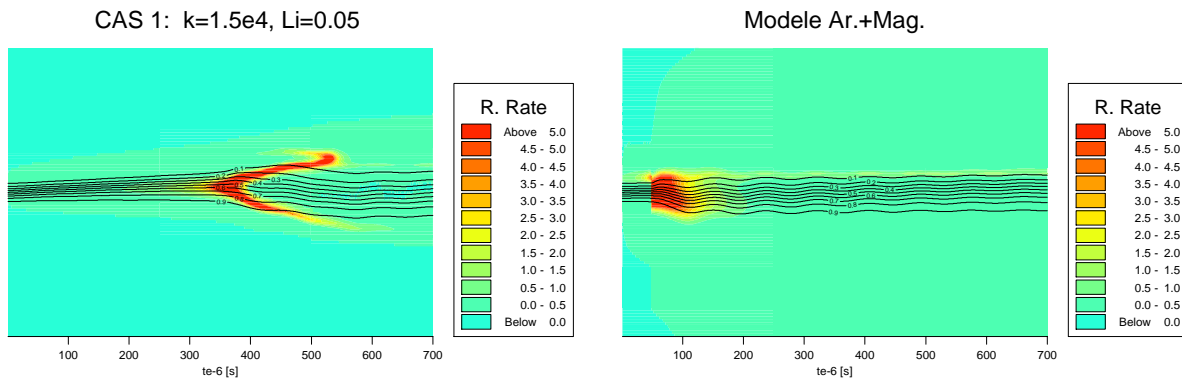


Figure 5.10 : Taux de réaction en fonction du temps dans le domaine de calcul. Comparaison entre les modèles PDFA/CHI et ARR/MAG. $k = 1.5e^4 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-2}$, $l_t = 0.05 \text{ cm}$.

continuité. Nous rappelons qu'il s'agissait d'une des conditions envisagées lors de sa conception. Au contraire, le critère de couplage entre les modèles d'Arrhenius et de Magnussen, basé sur une température de transition, ne peut pas garantir la continuité du taux de réaction. Avec le modèle ARR/MAG, le taux de réaction juste après l'auto-inflammation est maximum à des endroits où il était auparavant très faible (figure 5.9). Ceci est dû certainement à une valeur non appropriée de la constante B liée à la concentration de produits. Ce dernier terme du modèle de Magnussen (équation 2.67) est le terme dominant juste après l'auto-inflammation.

- Les délais et la localisation de l'auto-inflammation. L'allumage laminaire caractéristique de la formule d'Arrhenius ne tient pas compte de l'état du mélange. Dès que dans la même maille de calcul, les concentrations moyennes d'oxydant et de carburant sont non nulles, alors les deux espèces sont censées être complètement mélangées. Le premier point d'allumage apparaît à $\tilde{Z} = Z_{mr}$, tel que prévu par les analyses de Liñan [20] et de Mastorakos *et al.* [3]. Avec le modèle PDFA/CHI, il faut attendre que les deux espèces se mélangent et atteignent les conditions pour que la combustion puisse avoir lieu. En ce qui concerne l'endroit où l'allumage se produit, nous avons vu que lors de l'auto-inflammation, $P(Z = Z_{st})$ est maximale à $\tilde{Z} = 0.5$ (figure 5.8).
- La forme de la zone de réaction après l'auto-inflammation pendant la phase de combustion prémélangée. Avec le modèle PDFA/CHI, la flamme est née à $\tilde{Z} = 0.5$ et se propage ensuite vers des valeurs de \tilde{Z} inférieures et supérieures à 0.5. Elle s'éteint au fur et à mesure que les réactifs sont consommés. Avec le modèle ARR/MAG, le taux de réaction est très élevé partout où il y a des produits de la combustion. Une fois de plus, une valeur non adaptée de la constante B de l'équation 2.67 peut être à l'origine de ce phénomène.

Enfin, nous constatons l'accord entre les taux de réaction caractéristiques de la flamme de diffusion établie. Il s'agit d'un résultat prévisible car la chimie devient proche de la situation infiniment rapide. Une fois la flamme de diffusion établie, le taux de réaction est contrôlé par le taux de mélange entre les réactifs, ce dont les deux modèles tiennent compte.

5.2.4 Comparaison avec les résultats de simulation numérique directe de couche de mélange temporelle

Les caractéristiques des résultats obtenus en simulation numérique directe posent en général des difficultés vis à vis de leur comparaison avec les résultats donnés par des codes RANS. En raison de la taille des domaines de calcul utilisés en DNS, ainsi qu'à la structure adimensionnelle des équations résolues par le code NTMIX (code de DNS utilisé dans le CRCT), la transposition entre les deux types d'approches n'est souvent pas aisée. De même, les codes DNS ne sont en général adaptés qu'à la résolution de configurations physiques de grande simplicité. L'intérêt de faire des calculs avec des codes RANS reproduisant les configurations DNS est donc limité. Cependant, la nature simple du cas test 1D utilisé pour l'étude du modèle PDFA/CHI s'adapte bien à ce genre d'exercice. Nous avons vu dans la section 4.2.2 que la configuration de couche de limite temporelle calculée représente un système statistiquement 1D qui évolue dans le temps (comme les tests 1D effectués dans cette section). A défaut de résultats expérimentaux dans des configurations plus réalistes, ce test est donc un bon moyen de contrôler la validité du modèle PDFA/CHI lors de son implantation dans un code RANS.

La première tâche à réaliser est la transformation des paramètres adimensionnels DNS en unités physiques. Une variable X est calculée par le produit entre sa valeur adimensionnelle X^*

et sa valeur de référence X_{ref} ,

$$X = X^* X_{ref}$$

A partir du nombre de Reynolds de la DNS ($Re_{ac} = 10000$ dans le cas étudié),

$$Re_{ac} = \frac{a_{ref} L_{ref}}{\nu_{ref}} = 10000 \quad (5.6)$$

où a_{ref} , L_{ref} et ν_{ref} sont respectivement la vitesse du son, la longueur et la viscosité cinématique de référence, nous pouvons construire un cas réel pour KIVA. Les valeurs de référence des variables caractéristiques des espèces utilisées (densité, capacité calorifique, viscosité...) sont celles de l'air à la température $T = 300K$. Le tableau 5.4 est alors obtenu.

$Re_{ac} = 10000$	$\gamma = 1.4$	$R_{air} = 287 \text{ J/kgK}$
$T_{air} = 300K$	$\rho_{ref} = 1.177 \text{ kg/m}^3$	$\nu_{ref} = 1.568 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$
$a_{ref} = 347 \text{ m/s}$	$L_{ref} = 4.52 \times 10^{-4} \text{ m}$	$t_{ref} = 1.303 \times 10^{-6} \text{ s}$

Tableau 5.4 : Valeurs de référence des différentes variables de l'écoulement. Toutes les autres variables s'expriment en fonction de ces variables de référence.

Pour le calcul du taux de réaction, une hypothèse de chimie simple a été utilisée. Le taux de réaction instantané est donné par

$$\dot{\omega}_i = A \rho_F \rho_O \exp(-T_a/T) \quad (5.7)$$

Les unités de la constante pré-exponentielle correspondent au produit entre l'inverse d'un temps et l'inverse d'une densité. La formulation est ainsi cohérente avec celle utilisée en DNS.

Le carburant utilisé est le méthane (CH_4) dont la fraction de mélange stoechiométrique est $Z_{st} = 0.055$. L'oxydant est l'oxygène dont la fraction massique par rapport à l'air est 0.233. La température initiale du carburant est $T_{F,0} = 600K$ et la température initiale de l'oxydant est $T_{O,0} = 1200K$. Les profils des concentrations de carburant et d'oxydant sont initialisés de la manière décrite dans la section 5.2.1 en respectant la taille des profils utilisés en DNS. Par contre, \widetilde{Z}''^2 n'est pas initialisée de la manière choisie dans la section 5.2.2. En effet, en DNS nous n'avons pas le choix de la valeur de $\widetilde{Z}''^2_{t=t_0}$, car elle est forcément nulle. En choisissant d'initialiser Y_F et Y_O avec la solution de l'équation de transport diffusif de ces espèces en régime laminaire, nous sommes en train d'imposer un mélange total entre les deux espèces ($\widetilde{Z}''^2_{t=t_0} = 0$).

Un mot doit être aussi dit concernant les paramètres turbulents. Nous avons vu que la résolution des équations de transport de k et de ϵ n'est pas évidente dans un écoulement 1D. De plus, le comportement de ces grandeurs issues de la solution de leurs équations de transport modélisées n'est pas le même que celui de la turbulence utilisée dans les calculs de couche de mélange temporelle bidimensionnelle. En effet, l'utilisation d'une turbulence 2D en DNS sert nos propos du point de vue de l'interaction flamme champ turbulent, mais ne peut pas être

comparée à une turbulence réelle [68]. Quand les équations de Navier Stokes sont résolues dans leur forme 2D sans modèle de turbulence, la dynamique des structures turbulentes est différente de leur dynamique réelle. Le transfert d'énergie se fait des petites vers les grandes échelles. Ceci n'est pas reproductible avec le modèle $k - \epsilon$. Nous avons donc choisi d'imposer une turbulence homogène dans le domaine, même si ce n'est pas le cas, comme le montre le tableau 5.5.

t^*	ϵ^*	k^*
1.11	1.27×10^{-4}	5.56×10^{-3}
5.56	4.64×10^{-5}	3.35×10^{-3}
9.65	1.49×10^{-4}	8.90×10^{-3}
13.06	4.12×10^{-5}	4.84×10^{-3}
16.56	2.57×10^{-5}	2.00×10^{-3}
19.38	3.57×10^{-5}	2.25×10^{-3}

Tableau 5.5 : Evolution dans le temps des paramètres turbulents k et ϵ pour le calcul DNS 2D d'une couche de mélange temporelle.

Les résultats obtenus, présentés sur la figure 5.11, sont très satisfaisants. Le délai d'auto-inflammation calculé est proche du délai obtenu en DNS. L'endroit où, en moyenne la flamme s'allume, est aussi le même dans les deux cas (autour de $\tilde{Z} \approx 0.5$). Le modèle reproduit aussi la flamme de diffusion établie à la fin de l'auto-allumage.

Concernant les différences observées, il est clair que la forme de la zone de réaction n'est pas la même et que la diffusion turbulente n'est pas bien reproduite (phénomène observable à partir de la forme des iso-lignes de fraction de mélange). Ceci peut être expliqué par les approximations effectuées lors de la détermination des paramètres turbulents. Nous avons vérifié que le calcul était sensible au niveau de turbulence choisi. Les différences dans la forme de la zone d'auto-allumage ne peuvent pas être analysées de manière simple. Comme nous l'avons vu lors de la présentation de cette expérience numérique (section 4.2.2), les statistiques effectuées manquent de données. D'autres calculs devraient être réalisés en imposant une génération aléatoire de turbulence différente et en gardant la même physique.

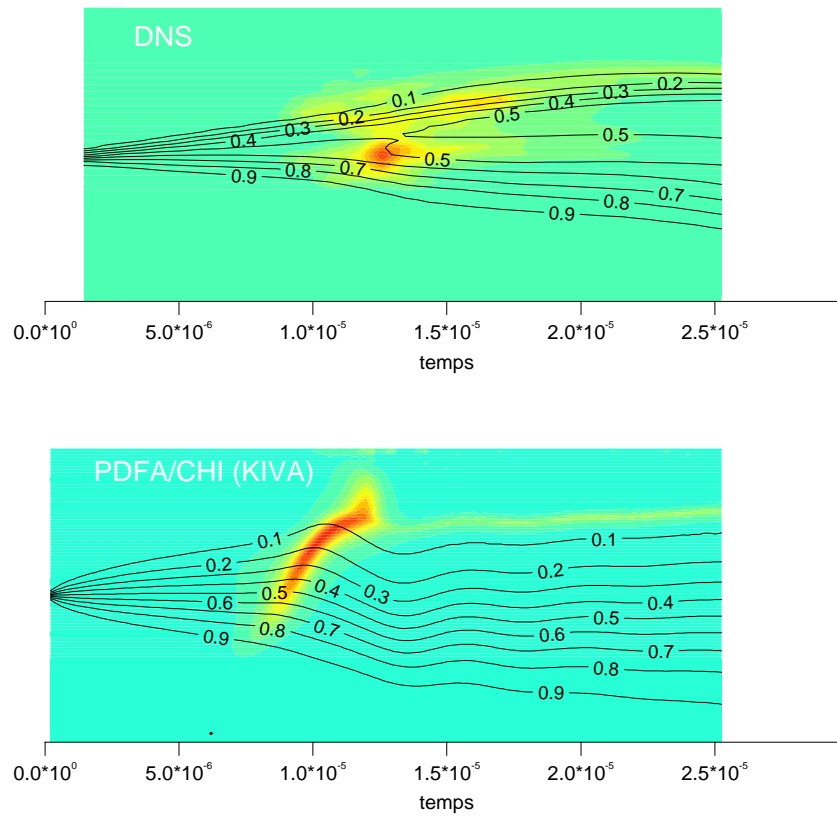


Figure 5.11 : Comparaison entre le taux de réaction moyen calculé en DNS dans le cas de la couche de mélange temporelle et celui calculé par KIVA II MB avec le modèle PDFA/CHI. Les lignes continues représentent les valeurs moyennes de la fraction de mélange au cours du temps dans le domaine 1D.

5.3 Conclusion

Une version simplifiée du modèle PDFA d'auto-allumage à *pdf* présumées, couplé à un modèle de flammelles en chimie infiniment rapide, a été implantée dans le code de calcul KIVA II MB. Les résultats obtenus lors de l'étude du modèle dans une configuration unidimensionnelle sont très satisfaisants. Le modèle contient des effets chimiques couplés à des effets turbulents qui lui permettent de reproduire l'auto-inflammation dans une gamme de situations assez variée.

L'adaptation effective au code KIVA et plus spécialement aux calculs moteur, demande quelques modifications du fait qu'il s'agit d'écoulements à pression et à volume variables et où les conditions initiales sont loin d'être homogènes et bien définies (présence de gaz non brûlés, présence de gaz résiduels ou échanges thermiques avec les parois). Il faut donc que les conditions limites ($Y_{i,0}$, $T_{i,0}$), nécessaires dans des différentes étapes de calcul, soient effectivement définies à chaque pas de temps de calcul.

Chapitre 6

Validation expérimentale et tests 2D

6.1 Introduction

Le modèle PDFA/CHI développé dans ce travail est fondé sur l'analyse numérique de phénomènes qui représentent de manière simplifiée l'ensemble de phénomènes qui ont lieu dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel. Si l'interprétation physique du problème provient de l'observation expérimentale [69, 80, 81], les bases et la validation du modèle PDFA/CHI ont été construites à partir de résultats de simulation numérique directe.

La validation du modèle dans des configurations réelles de combustion Diesel donne une étape importante de cette étude. Dans cette section, nous décrivons une expérience dont le but est l'acquisition de données par rapport auxquelles le modèle peut être testé et validé.

Dès le début de ce travail, la décision a été prise de ne pas traiter l'aspect diphasique de la combustion Diesel. Ceci en raison des difficultés rencontrées dans la modélisation du comportement des jets Diesel liquides. Nous nous sommes concentré uniquement sur la combustion en milieu gazeux. Le besoin de rester cohérent avec cette description du problème implique que le dispositif expérimental à mettre en oeuvre doit respecter cette condition. Or, les études expérimentales en conditions Diesel effectuées avec des carburants gazeux restent très limitées. Nous retrouvons dans Fraser *et al.* [94] et dans Naber *et al.* [95] des expériences d'auto-inflammation de jets de gaz naturel introduits dans une enceinte pressurisée et chauffée. Les conditions thermodynamiques atteintes sont proches de celles retrouvées dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel. Cependant, ces études concernent uniquement la variation des délais d'auto-inflammation en fonction de la pression et de la température à l'intérieur de la chambre de combustion et en fonction de la composition des carburants utilisés.

Les tests et la validation d'un modèle turbulent d'auto-inflammation et de combustion exigent aussi la variation des paramètres qui influencent la réponse du modèle par rapport au champ turbulent. Dans cette optique, les paramètres importants sont la vitesse du jet de carburant à la sortie de l'injecteur et la section débitante. Ces deux paramètres sont capables de modifier les gradients des concentrations des espèces et par conséquent, le mélange. Pour un écoulement liquide, la vitesse de sortie du carburant est contrôlée par la différence entre la pression d'injection et la pression dans la chambre de combustion. Si l'écoulement est gazeux et donc compressible, alors c'est le rapport entre la pression d'injection et la pression dans la chambre qui contrôle la vitesse. Ceci jusqu'à la limite imposée par la vitesse du son de l'écoulement dans l'injecteur. Cette limite est calculée par l'équation 6.1,

$$\frac{p_{inj}}{p_{crit}} = \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{-\frac{\gamma}{\gamma+1}} \quad (6.1)$$

où p_{crit} est la pression critique pour laquelle l'écoulement devient sonique et p_{inj} est la pression d'injection. Pour $\gamma = 1.4$, ce ratio est de 1.893. En effet, dans ces conditions l'écoulement est sonique à l'intérieur de l'injecteur et la vitesse d'injection atteint sa valeur maximale, égale à la vitesse du son au sein du milieu gazeux traité¹. Pour faire varier la vitesse d'injection, il faut donc faire varier la pression jusqu'à la limite sonique donnée par l'équation 6.1. Pour modifier le mélange, nous pouvons aussi faire varier la section débitante de l'injecteur.

La visualisation de la zone de réaction est aussi un paramètre intéressant dans les études d'auto-allumage turbulent et d'établissement de flammes. L'accès optique à la chambre de combustion est donc important dans les études à réaliser. Pour cela, nous pouvons utiliser un montage expérimental disponible à l'IFP qui inclut une cellule haute pression avec accès optique munie d'un injecteur de gaz. Une description détaillée du fonctionnement de ce système existe dans la thèse de Lambert [96] et dans les travaux de Verhoeven [97] et de Verhoeven *et al.* [98].

Le modèle PDF/A/CHI peut être enfin appliqué au calcul d'une configuration réaliste mais simplifiée qui représente bien le système expérimental étudié. Dans ce cas, le modèle est appliqué exactement comme s'il s'agissait d'un calcul moteur. Toutes les équations de transport (celles du modèle de turbulence incluses) sont résolues. Rappelons que dans les études 1D du modèle présentées dans le chapitre précédent, les paramètres turbulents étaient imposés et constants pendant la durée du calcul.

¹Pour un gaz parfait, la vitesse du son ne dépend que de sa nature et de sa température, $C_\infty = \sqrt{\gamma RT}$

6.2 Montage expérimental

Nous présentons maintenant les principales caractéristiques du système étudié, ainsi que quelques commentaires succincts sur son utilisation. Le montage expérimental consiste en deux composants majeurs: la cellule de volume constant (volume de 1.37 l) où la combustion se déroule, et un injecteur de carburants gazeux. L'ensemble de la cellule et de l'injecteur est représenté sur la figure 6.1. Ce dispositif offre un large accès optique à travers quatre hublots en saphir. L'injecteur gaz a été développé et fabriqué par la société DTC (Diesel Technology Corporation) pour être adapté sur des moteurs Diesel fonctionnant au gaz naturel. L'injecteur possède une aiguille, contrôlée électriquement par un solénoïde, qui ferme et ouvre l'orifice d'injection.

Les parois de la cellule (en acier) peuvent être chauffées électriquement de manière à réduire les pertes thermiques lors des essais de combustion et à s'approcher de la température des parois de la chambre de combustion d'un moteur. Sur toutes les expériences menées, la température des parois a été de 473 K . Sur chacun des huit coins de la cellule, il existe un accès qui permet le placement d'appareils divers. Quatre bougies d'allumage dont nous parlerons ensuite, un capteur de pression et un ventilateur constituent la base des appareils utilisés. Le ventilateur sert à homogénéiser les gaz dans la chambre, ainsi qu'à la production d'un champ de vitesse turbulent dans son intérieur. Les bougies d'allumage servent à l'initialisation de la combustion d'un prémélange qui brûle de manière contrôlée et qui permet la montée en température et en pression dans la chambre avant la combustion du jet gazeux de carburant à injecter.

L'étanchéité de l'injecteur est garantie jusqu'à des pressions proches de 200 bar . Le gaz à haute pression est stocké dans un réservoir et la pression d'injection est contrôlée par un manomètre à la sortie de ce réservoir. L'injecteur est placé au centre de la face supérieure de la cellule. L'ouverture de l'injecteur est contrôlée électriquement (levée de l'aiguille) et sa fermeture est assurée par un ressort qui agit une fois que le courant électrique alimentant le solénoïde est arrêté. Ce courant est contrôlé par un boîtier de commande du type utilisé pour les injecteurs de liquide, système "Common Rail", qui envoie un courant initial de forte intensité et de petite durée (0.6 ms pour toutes les expériences) et ensuite, un courant de maintien d'intensité plus faible pendant un intervalle de temps qui dépend de la durée d'injection souhaitée.

Nous disposons de trois nez d'injecteur différents avec des sections débitantes correspondant respectivement à des diamètres de 0.25 mm , 0.3 mm et 0.5 mm . La pression maximale d'injection est d'environ 200 bar , égale à la pression du carburant dans le réservoir quand celui-ci est plein. Le carburant choisi est le méthane, malgré ses propriétés reconnues de résistance à l'auto-inflammation (indice d'octane de 120). Ce choix est dû au fait qu'il s'agit d'un carburant gazeux jusqu'à des pressions au-dessus desquelles nous voulons travailler. Il est disponible en bouteilles remplies jusqu'à 200 bar . Il existe dans la littérature, des travaux sur l'auto-inflammation de jets de méthane à haute pression [94, 95] sur lesquels nous nous sommes basés pour l'établissement des paramètres de référence de cette expérience.



Figure 6.1 : Cellule de combustion haute pression avec accès optique et injecteur de gaz.

6.3 Procédure expérimentale et résultats

L'étude expérimentale de l'auto-inflammation d'un jet de combustible gazeux en milieu turbulent contient les aspects suivants:

- Caractérisation de l'injecteur. Ceci nous permet de connaître son comportement en fonction du courant électrique d'activation de l'aiguille. Nous voulons mesurer le délai d'ouverture de l'aiguille après l'imposition du courant et le délai de fermeture lorsque le courant électrique est enlevé. La durée de l'injection peut ainsi être connue.
- Mesure de la masse injectée en fonction de la pression d'injection et de la pression dans la chambre. En connaissant la masse introduite par injection et la durée de l'injection, le débit massique peut être calculé.
- Visualisation des contours du jet gazeux avec des films Schlieren. Les résultats de la modélisation de l'aérodynamique des écoulements de jets gazeux avec le code KIVA peuvent ainsi être contrôlés. Un repère, fonction de la position du jet, pour les images d'auto-inflammation est aussi construit. Nous pouvons donc regarder à quel endroit du jet les premiers points d'auto-inflammation apparaissent.
- Visualisation des points d'auto-inflammation et des délais. Les paramètres que nous pouvons faire varier, visant les comparaisons avec le calcul numérique, sont: la section débitante, la température, la pression et la proportion d'oxygène dans la chambre.

6.3.1 Caractérisation de l'injecteur

La réponse de l'injecteur au courant électrique imposé sur le solénoïde d'activation de l'aiguille a été étudiée par quatre méthodes différentes:

- Mesure de la force induite par le jet gazeux à la sortie de l'injecteur sur un capteur de force piézoélectrique.
- Mesure de la température du méthane à la sortie de l'injecteur avec un thermocouple de réponse rapide ($0.25 \mu m$ de diamètre).
- Mesure de l'accélération des parties mobiles de l'injecteur avec un accéléromètre attaché au corps de l'injecteur.
- Observation des images (films Schlieren) captées pendant l'injection.

Le capteur de force, le thermocouple et l'accéléromètre étaient connectés à un oscilloscope numérique.

Des mesures ont été effectuées pour des temps d'activation du solénoïde différents en faisant changer aussi la pression d'injection. La chambre de combustion était dans ce cas à pression atmosphérique. Nous avons utilisé cette valeur car les caractéristiques de l'injecteur ne doivent pas changer en fonction de la pression dans la chambre. Les résultats pour une injection à $p_{inj} = 50 \text{ bar}$ et un temps d'activation du solénoïde de 15 ms sont présentés sur la figure 6.2. La forme caractéristique des courbes présentées ne change pas avec la modification du temps d'activation.

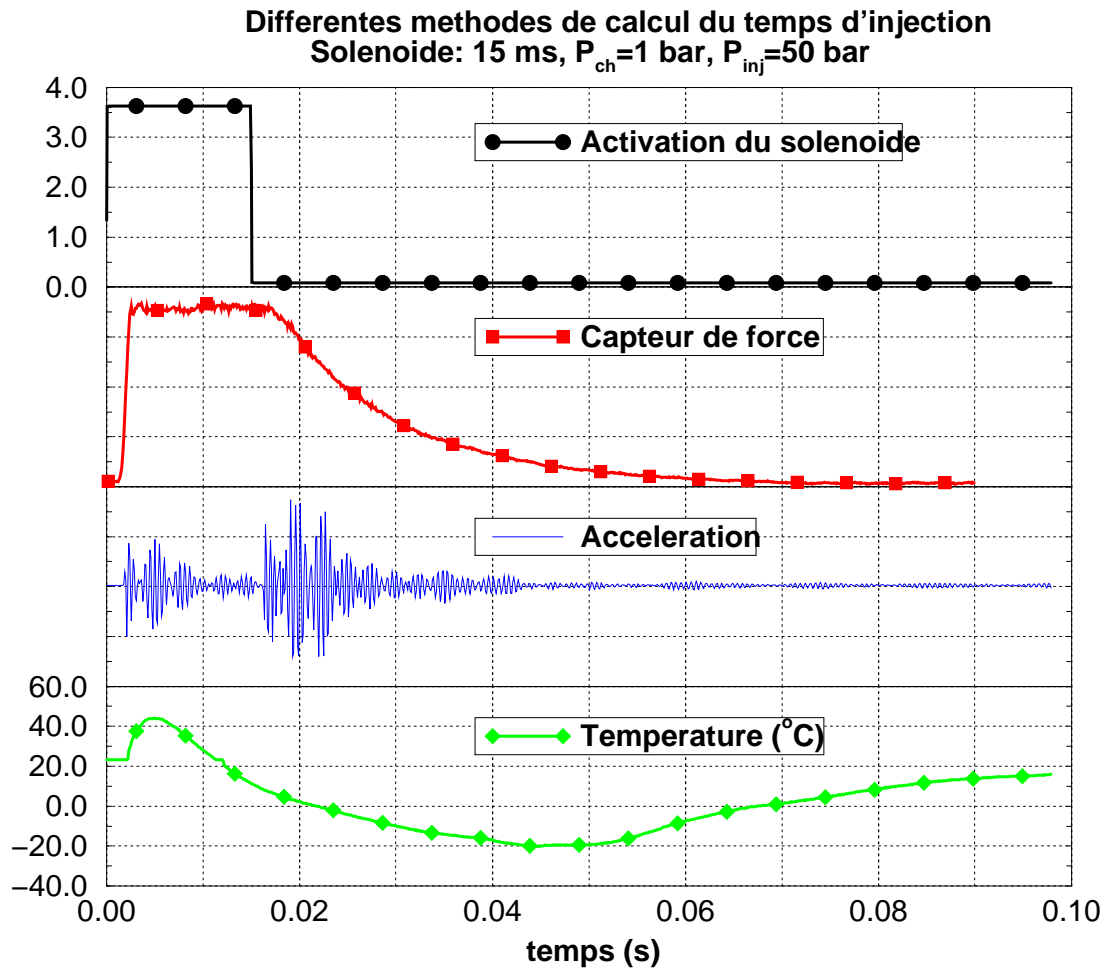


Figure 6.2 : Caractérisation de l'injecteur: Temps d'injection.

Les résultats montrent que certaines caractéristiques du fonctionnement de cet injecteur sont différentes de celles observées avec des injecteurs de liquide [97, 98]. Dans les deux cas (liquide et gaz), nous pouvons observer un décalage du début d'injection par rapport au début de l'activation du solénoïde par le courant de maintien (montée brusque du signal mesuré par le capteur de force). Pour l'injecteur étudié, ce décalage est d'environ 1.5 ms , indépendamment des paramètres d'injection. Cependant, dans le cas de l'injection de gaz, nous n'observons pas de décroissance rapide lorsque le courant est enlevé comme il est obtenu pour les injecteurs de liquide. L'injection semble se prolonger bien au-delà de la coupure du courant, même si son intensité diminue au fur et à mesure. Ce comportement se traduit par la descente graduelle de la force induite par le jet, ainsi que par la diminution constante de la température. La courbe d'accélération des parties mobiles de l'injecteur peut expliquer ce comportement. En effet, il semble qu'à partir du moment où le courant est enlevé, l'aiguille ne se pose pas directement sur son siège. L'oscillation du signal d'accélération montre que l'aiguille rebondit pendant un certain temps s'ouvrant et se fermant avec une amplitude décroissante des oscillations. A partir du moment où le courant est arrêté, l'écoulement devient pulsé et très irrégulier. Sur les injecteurs de liquide ce comportement est aussi connu, mais les forces visqueuses plus importantes que dans un écoulement gazeux, atténuent vite les oscillations. Nous avons donc intérêt à que les expériences d'auto-inflammation se déroulent pendant la phase initiale de l'injection. Pendant cette période, nous pouvons estimer la vitesse du jet qui est un paramètre important dans les calculs de modélisation.

Le signal capté par le thermocouple met en évidence les caractéristiques soniques de l'écoulement dans le nez de l'injecteur quand le rapport entre la pression d'injection et la pression dans la chambre est élevé. En effet, si l'écoulement est sonique, la pression dans le nez ne descend pas en dessous de la pression critique de l'écoulement, environ deux fois inférieure à la pression d'injection (équation 6.1). A la sortie du nez, la pression de l'écoulement est supérieure à la pression atmosphérique. Une expansion du gaz pour établir l'équilibre des pressions a alors lieu, avec une chute de la température. La montée initiale est probablement due au frottement visqueux du gaz à très haute vitesse sur le thermocouple en début d'injection.

6.3.2 Masse injectée

La masse injectée par coup d'injection a été déterminée en mesurant l'augmentation de la pression due à l'accroissement de la masse totale de gaz dans une chambre à volume constant de 1.37 l (la même utilisée dans les essais de combustion) et de température connue (mesurée à l'intérieur de la chambre de combustion après un certain délai de temps pour que le système soit en équilibre). Nous avons effectué des moyennes sur 50, 100 et 200 injections. Les mesures étaient très répétitives. Les paramètres de cette étude étaient la pression d'injection, la pression dans la chambre et le temps d'activation du solénoïde.

Les résultats sont présentés sur les figures 6.3 et 6.4. La première montre la dépendance linéaire entre la quantité de méthane injectée et le temps d'activation de l'aiguille. La deuxième montre que la masse injectée dépend surtout de la pression d'injection. En effet, les évolutions des quantités injectées en fonction de la pression d'injection pour des différents temps d'activation de l'aiguille sont presque linéaires. Pour les expériences avec auto-inflammation, nous pouvons nous repérer par rapport à la pression d'injection pour connaître la masse injectée pendant chaque expérience.

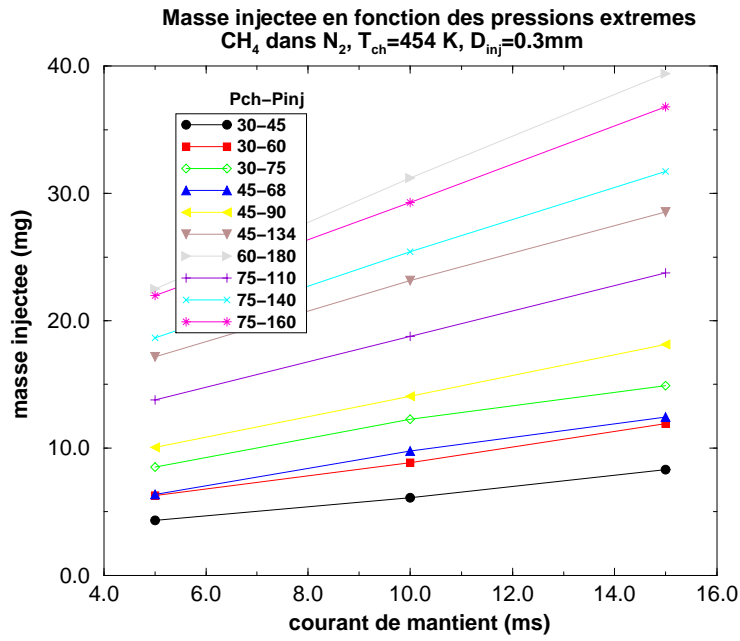


Figure 6.3 : Masse injectée par coup d'injection en fonction du temps d'activation du solénoïde, de la pression dans la chambre de combustion et de la pression d'injection. $D_{inj} = 0.3 \text{ mm}$.

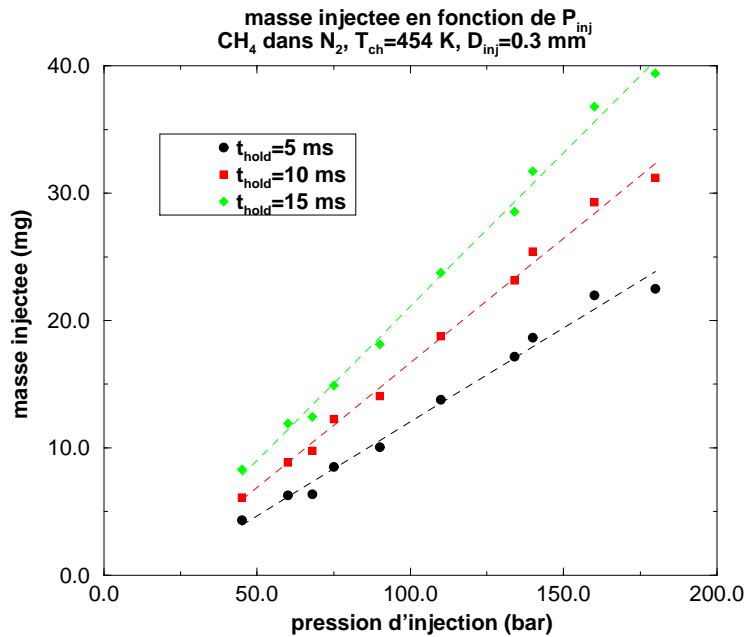


Figure 6.4 : Masse injectée par coup d'injection en fonction du temps d'activation du solénoïde, de la pression d'injection. $D_{inj} = 0.3 \text{ mm}$.

Le débit massique de méthane devrait être déterminé à partir des quantités injectées et du temps d'injection mesuré précédemment. Cependant, l'incertitude concernant le taux d'introduction du combustible à partir du moment où le courant agissant sur l'aiguille est enlevé, implique des difficultés dans la détermination de la vitesse d'injection. Pendant la période où le solénoïde est activé, la vitesse de l'écoulement semble être constante. D'où l'intérêt pour la modélisation de travailler avec des rapports de pression (équation 6.1) supérieurs à la valeur critique. Dans ce cas, la vitesse est connue. Elle sera proche de la vitesse du son caractéristique de l'écoulement à l'intérieur du nez de l'injecteur.

6.3.3 Caractéristiques du jet gazeux

Des films Schlieren ont été utilisés pour visualiser les contours du jet gazeux de méthane qui pénètre dans la chambre de combustion (montage optique de la figure 6.5). Le volume de mesure qui contient le jet est illuminé par un faisceau laser parallèle. La direction suivie par chaque rayon dépend de l'indice de réfraction du milieu. L'indice de réfraction dépend de la nature des molécules des milieux traversés et aussi de leur densité (température). Après avoir traversé le volume de mesure, le faisceau collimaté est focalisé par une lentille (7) sur le centre du trou d'un diaphragme (9). Les rayons qui ont été déviés en traversant le volume de mesure ne convergent pas sur le centre du trou et sont donc arrêtés par la partie fermée du diaphragme. Ces rayons sont ceux provenant des contours du jet de méthane froid, où le gradient de température est très fort. Ils ne sont donc pas projetés sur la caméra. Les images de l'évolution du jet au cours du temps ont été acquises par une caméra rapide légèrement intensifiée, capable d'enregistrer 18 images à une cadence variable choisie par l'utilisateur de 10000, de 25000 ou de 50000 images par seconde. Les images, qui apparaissent sur un écran à phosphore au dos de la caméra sont numérisées en temps réel par une autre caméra à détecteur CCD couplée à la première. L'image numérique est transmise à un ordinateur qui contrôle tout le système, où elle est par la suite traitée. Le temps d'exposition de chaque image est de $19 \mu s$.

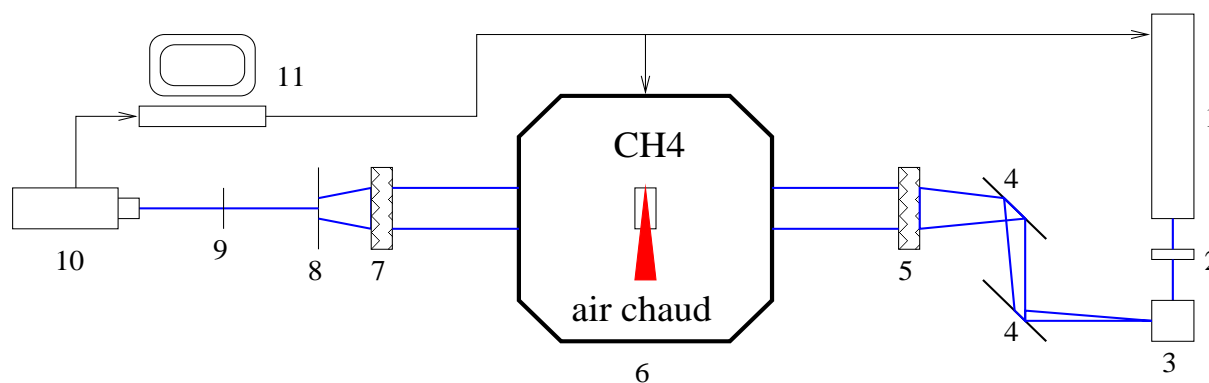


Figure 6.5 : Montage optique utilisé pour la visualisation de jets gazeux par la méthode de Schlieren. 1) Laser argon ($\lambda = 488 \text{ nm}$). 2) Obturateur. 3) Filtre spatial. 4) Miroir. 5) Lentille de parallélisation du faisceau laser. 6) Cellule haute pression. 7) Lentille convergente ("Schlieren"). 8) Panneaux cache. 9) Diaphragme. 10) Caméra rapide avec numériseur CCD. 11) PC de contrôle du système et de traitement d'image.

Des expériences ont été réalisées pour des différentes conditions de pression d'injection et de pression dans la chambre de combustion. L'intervalle de temps d'activation du solénoïde a aussi été varié.

La figure 6.6 montre une séquence typique de seize images obtenues lors des premiers instants de l'injection de méthane. Chaque image représente le volume de mesure intégré dans la direction du faisceau laser. Le résultat est un plan qui fait 2.7 cm de largeur et 5.9 cm de hauteur (entre le bout du nez de l'injecteur et le bas de l'image). Le nez de l'injecteur correspond au petit rectangle noir en haut et au centre de chaque image. La séquence d'images séparées de 0.1 ms est ordonnée selon le tableau suivant:

01	03	05	07	09	11	13	15
02	04	06	08	10	12	14	16

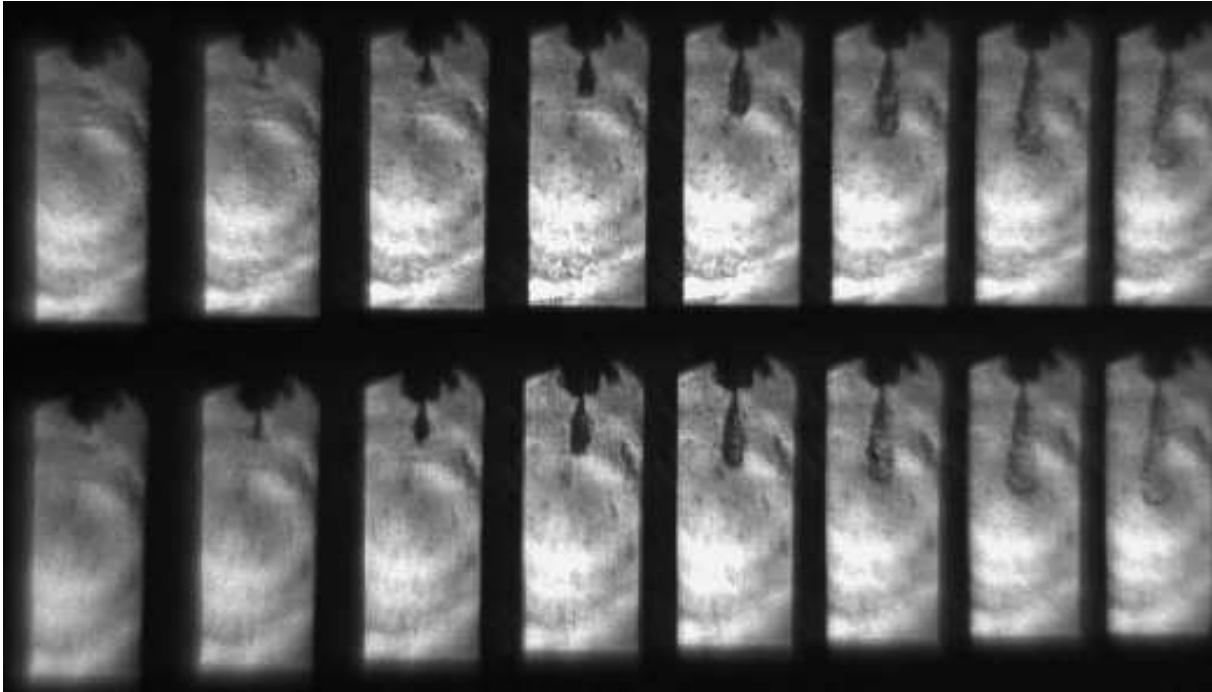


Figure 6.6 : Séquence typique d'images acquises par films Schlieren de contours des jets de méthane. $D_{inj} = 0.25\text{ mm}$, $p_{inj} = 110\text{ bar}$, $p_{ch} = 33.6\text{ bar}$, $T_{ch} = 453\text{ K}$. Première image: 1.5 ms après l'activation du solénoïde. Dernière image: 1.5 ms après la première image.

La caméra a été déclenchée 1.5 ms après le début de l'activation du solénoïde. Cet instant correspond environ au moment où les différents appareils utilisés dans les mesures de temps d'injection (figure 6.2) commencent à capter un signal. En effet, les premiers contours du jet sont visibles sur l'image numéro 2. L'intervalle de temps entre chaque image est de 0.1 ms . La séquence d'images présentée est très répétitive, quelles que soient les conditions de l'injection.

En augmentant la pression d'injection, le jet devient plus fin près de l'injecteur et légèrement plus large au bout. Cependant, sa pénétration ne change pas, car l'écoulement est toujours sonique dans le nez de l'injecteur et la vitesse d'injection est constante. Les deux diamètres d'injection différents ne semblent pas modifier les contours du jet. Des images ont aussi été prises plus loin du début de l'injection, mais à cause de l'homogénéisation du champ de température, les contours du jet s'estompent très vite. Il est cependant visible que la pénétration augmente, tant que l'injection dure. Les images prises après que le courant électrique d'activation du

solénoïde soit arrêté confirment le fait que l'injection se poursuit encore pendant longtemps après cet instant.

6.3.4 Auto-inflammation des jets de méthane

L'objectif des expériences décrites est l'étude de l'auto-inflammation et de la combustion Diesel. Pour cela, il faut que les conditions thermodynamiques dans la cellule au moment de l'injection du méthane s'approchent de celles de la chambre de combustion d'un moteur Diesel. Les gaz dans la cellule, initialement à pression atmosphérique et à une température d'environ 473 K (température des parois) doivent être comprimés et chauffés. La manière de le faire est de réaliser une pré-combustion qui les amènent jusqu'aux conditions souhaitées. Il faut cependant garantir que les produits de cette combustion aient des concentrations proches de celles de l'air utilisé dans le moteur Diesel.

Un prémélange qui contient de l'éthylène (C_2H_4), de l'oxygène (en excès), de l'hydrogène et de l'azote est introduit dans la cellule dans des proportions telles que la concentration des produits de combustion s'approche de celle de l'air. Le mélange est homogénéisé au fur et à mesure, à l'aide du ventilateur et est ensuite allumé par les quatre bougies d'allumage. La température et la pression montent alors soudainement à cause de la combustion presque instantanée (figure 6.7).

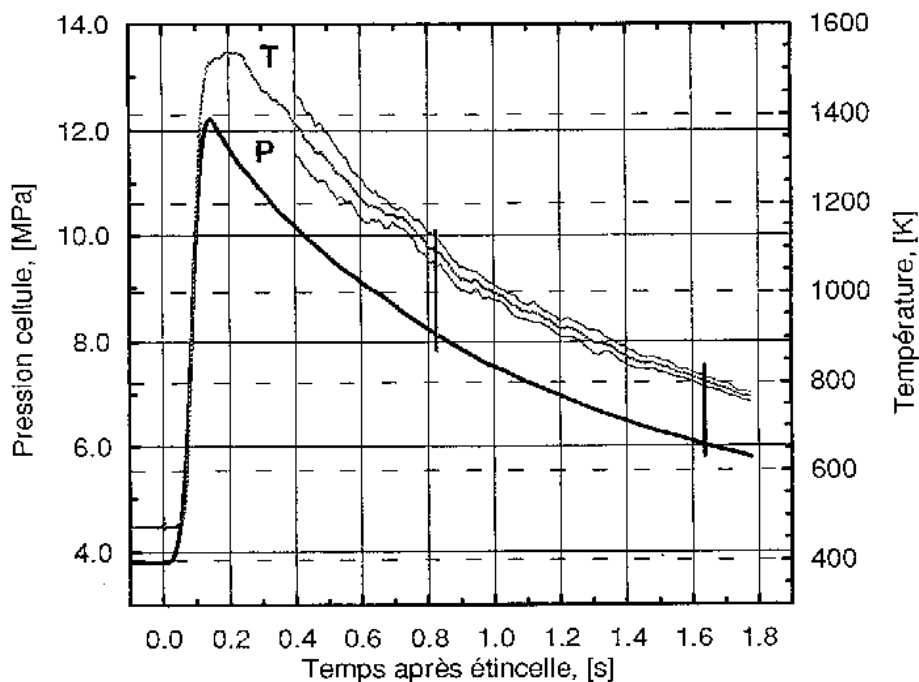
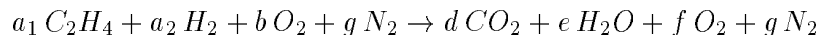


Figure 6.7 : Evolution de la pression et de la température dans la cellule en fonction du temps après l'allumage du prémélange décrit dans le tableau 6.1 (mélange de densité $\rho = 25\text{ kg m}^{-3}$). D'après Verhoeven.

Les produits de la combustion subissent ensuite une évolution supposée isochore (volume constant) avec baisse de la température et de la pression. Quand ces deux grandeurs atteignent

des valeurs prédéfinies, censées représenter les conditions thermodynamiques présentes dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel, le méthane est injecté. Le temps caractéristique de la chute de la pression et de la température après la pré-combustion, long par rapport au temps caractéristique du processus d'auto-inflammation du méthane, garantit des conditions thermodynamiques quasi constantes pendant ce dernier mécanisme. Le tableau 6.1 présente les valeurs des pressions partielles de chacun des réactifs de la combustion prémélangée ainsi que les proportions des produits de la réaction pour une densité constante de 25 kg m^{-3} après la pré-combustion. La réaction complète est du type,



Espèce	Réactif (bar)	Produit (%vol)
C_2H_4	0.296	-
H_2	3.45	-
O_2	10.0	21.00
N_2	23.16	65.84
H_2O	-	11.48
CO_2	-	1.68

Tableau 6.1 : Pressions partielles des réactifs avant la pré-combustion et proportions volumétriques des produits de la combustion. Pour une réaction adiabatique, la pression maximale atteinte est de 118 bar et la température maximale est de 1591 K (densité de 25 kg m^{-3}). Dans l'air, l'oxygène et l'azote sont dans une proportion volumétrique d'environ 21% O_2 pour 79% N_2 .

Le délai d'auto-inflammation est mesuré à partir des signaux indépendants de la lumière captée par une photo-diode et de la pression dans la chambre de combustion. La photo-diode est très sensible et a un temps de réponse très court. Nous pouvons ainsi caler la caméra rapide par rapport au début de l'auto-inflammation de manière à observer la localisation des premiers points lumineux. Le fait que la caméra soit peu intensifiée implique que les premières images acquises correspondent à la combustion riche et/ou à celle des suies, qui sont assez lumineuses pour pouvoir être enregistrées.

Nous présentons les résultats obtenus lors de trois expériences différentes, où nous avons fait varier la température et la pression dans la chambre de combustion lors de l'injection du méthane et aussi la pression d'injection.

L'évolution de la pression dans la chambre de combustion et l'évolution de l'intensité lumineuse émise par la combustion sont représentées sur la figure 6.8. Les courbes de pression sont étalonnées par la valeur du signal de pression au temps t_0 ($p = \text{tension} \times \text{gain} + p_{et}$ avec tension en V , $\text{gain} = 20$ et la pression d'étalonnage $p_{et} = 37.0 \text{ bar}$). Ce temps $t_0 = 0.0$ correspond au début de l'alimentation électrique du solénoïde. Nous rappelons que l'injection démarre environ 1.5 ms après cet instant.

La comparaison entre les courbes 1 et 2 montre que la température a, comme prévu, un très fort effet sur le délai d'auto-inflammation. Pour une température initiale des gaz dans la chambre de combustion de 950 K , le délai d'auto-inflammation mesuré par le capteur de

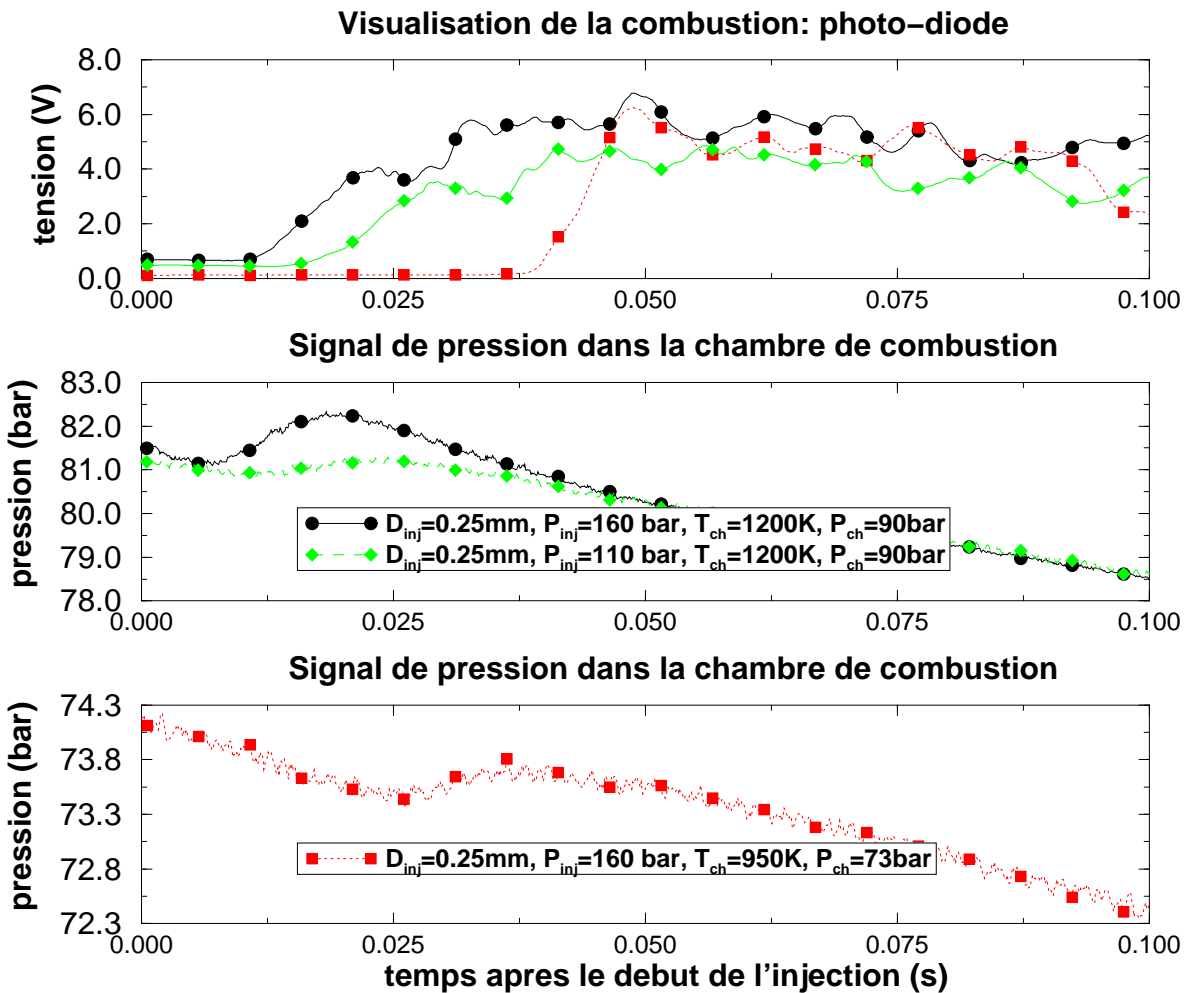


Figure 6.8 : Auto-inflammation et établissement de la flamme de diffusion. Intensité lumineuse émise par la combustion (mesures avec la photo-diode) et pression dans la chambre de combustion pour différentes températures initiales et pressions d'injection différentes.

pression et par la photo-diode est environ quatre fois plus grand que pour une température initiale de 1200 K .

Il est aussi intéressant de noter que pour des températures élevées, les signaux de pression et de lumière captée par la photo-diode indiquent environ le même délai d'auto-allumage. Au contraire, à basse température ces signaux ne donnent pas la même information. Cette différence entre le délai mesuré par la photo-diode et par le capteur de pression a toujours été observée pour les expériences réalisées à des températures inférieures à 1000 K . Ceci semble montrer qu'à basse température, le carburant a beaucoup de temps pour se mélanger avec l'oxydant et que lorsque l'auto-inflammation a lieu, une grande partie du carburant est consommé par une flamme de prémélange. Cette flamme est très énergétique et fait monter la pression. Mais comme il s'agit d'une flamme de prémélange, elle n'est pas assez lumineuse pour pouvoir être détectée par la photo-diode (son intensité lumineuse est beaucoup plus faible que celle de la flamme de diffusion qui se forme par la suite). Quand la température de la chambre de combustion au moment de l'injection descend à 900 K , l'auto-allumage devient très irrégulier. Il y a souvent des ratés et le temps laissé aux réactifs pour se mélanger est tellement long que tout le carburant se mélange avec l'air. La seule flamme observée (à l'oeil) est une flamme bleue. Il n'y a apparemment pas de flamme de diffusion. En tout cas, ces conditions sont très loin de ce que l'on peut chercher dans un moteur et n'ont donc pas d'intérêt pratique. Cependant, elles aident à la compréhension des mécanismes de la combustion Diesel.

En ce qui concerne l'influence de la pression d'injection pour les mêmes conditions de pression et de température dans la chambre (courbes 1 et 3), une petite différence entre les délais d'auto-inflammation mesurés est observée. Comme la masse injectée est inférieure quand la pression décroît (par effet de la diminution de la densité), il est possible que la quantité de mélange qui s'allume dans le cas de la pression d'injection la plus faible ne soit pas suffisante pour que la montée en pression et la lumière émise puissent être comparables à celles mesurées avec une pression plus importante. Il est aussi probable que la vitesse et la forme de l'écoulement dans le nez de l'injecteur changent suffisamment pour que le mélange se fasse de manière différente dans les deux cas.

Les figures 6.9 et 6.10 montrent les images d'auto-inflammation et d'établissement des flammes de diffusion correspondant aux configurations où la pression d'injection change. La disposition et la séquence des images sont les mêmes que celles décrites pour la figure 6.6. L'injecteur est visible en haut et au centre de chaque image. Les couleurs des images de la flamme ont été inversées (flammes représentées par des tâches noires). La caméra est déclenchée dès que la photo-diode capte les premières émissions de lumière.

A une température initiale de 1200 K dans la chambre de combustion, l'auto-inflammation a lieu sur la périphérie du jet, entre l'injecteur et le bout. La flamme se propage alors rapidement vers l'amont et l'aval de l'écoulement. Des comparaisons directes entre les contours du jet et les sites d'auto-inflammation ne peuvent pas être effectuées, car les délais d'auto-inflammation sont assez tardifs dans le processus d'injection. Comme il a été vu auparavant, les contours des jets sont moins identifiables à ces instants. La figure 6.10 donne la fausse impression que la flamme de diffusion est décalée latéralement par rapport à l'injecteur (images 11 à 16 de cette figure). Comme les images de la flamme et les images de référence utilisées pour localiser l'injecteur ne sont pas prises aux mêmes instants, il se peut qu'elles ne correspondent pas exactement les unes par rapport aux autres.

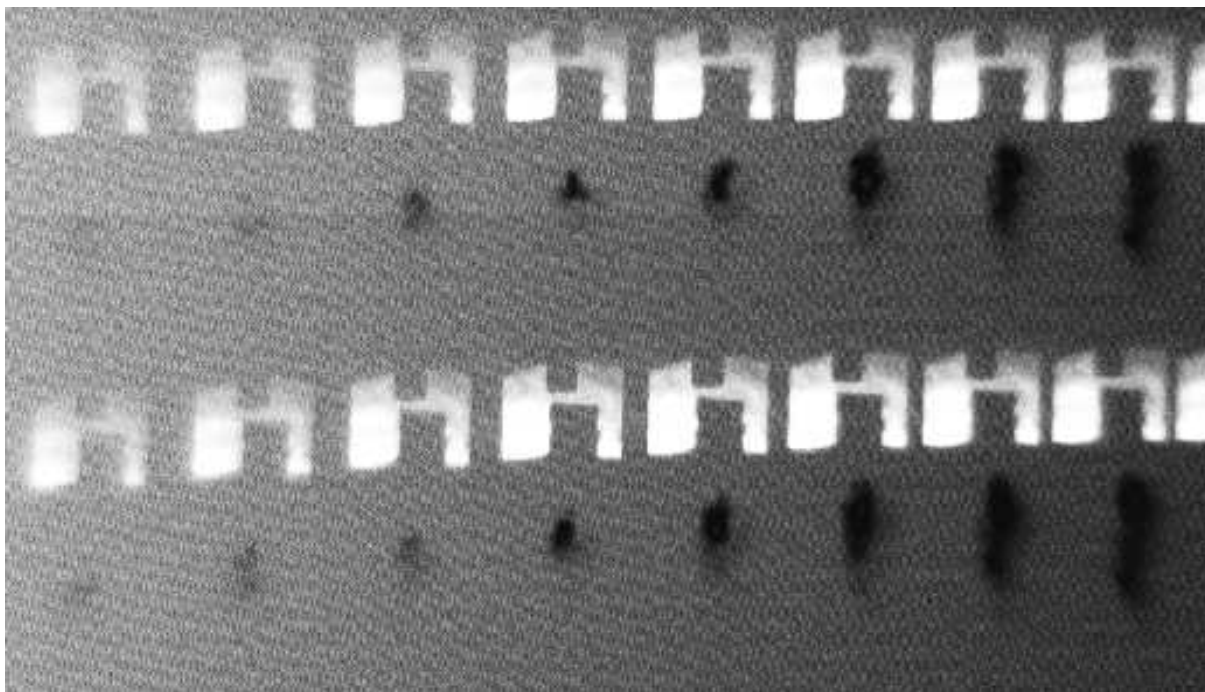


Figure 6.9 : Auto-inflammation du jet de méthane. $D_{inj} = 0.25 \text{ mm}$, $p_{inj} = 160 \text{ bar}$, $T_{ch} = 1200 \text{ K}$. La première image est prise 10.4 ms après le début de l'activation du solénoïde.

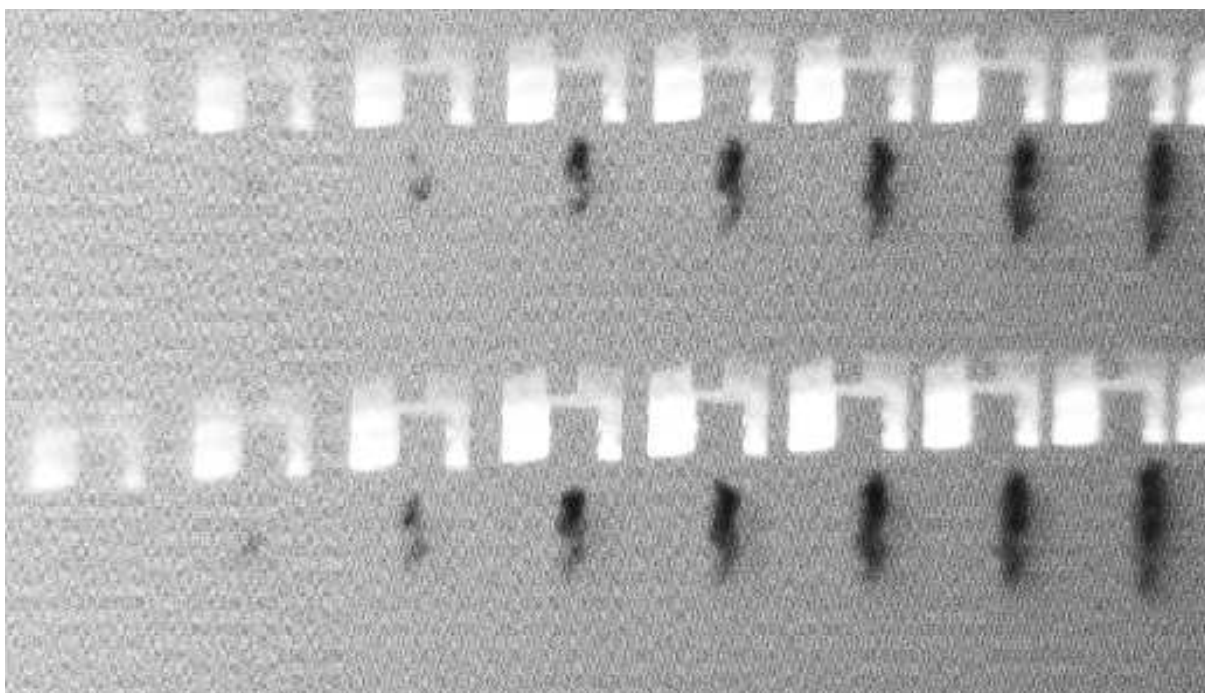


Figure 6.10 : Auto-inflammation du jet de méthane. $D_{inj} = 0.25 \text{ mm}$, $p_{inj} = 110 \text{ bar}$, $T_{ch} = 1200 \text{ K}$.

6.4 Tests 2D

6.4.1 Description du problème

Dans le chapitre précédent, nous avons décrit l'implantation du modèle PDFA/CHI dans un code RANS (le code KIVA II). Dans le chapitre 4, des grandeurs issues de la DNS étaient introduites directement dans le modèle pour le calcul du taux de réaction. Dans le chapitre 5, tous les paramètres du modèle étaient calculés dans le code RANS mais les différentes grandeurs turbulentes étaient imposées pendant la durée du calcul. Dans ce chapitre, nous atteignons le niveau 3 de la modélisation (figure 1.4, chapitre 1), où toutes les grandeurs sont calculées par le code RANS.

Nous étudions un système qui simule un écoulement proche, du point de vue thermodynamique, de ce que nous pouvons trouver dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel. Il s'agit de l'injection d'un carburant gazeux froid dans une atmosphère oxydante chaude et à haute pression.

La chambre de combustion est cylindrique, ce qui constitue une simplification par rapport à la forme de la chambre de combustion étudiée expérimentalement (figure 6.1). Le carburant gazeux est injecté sur l'axe de la chambre. La symétrie axiale du système permet un traitement numérique simplifié à travers l'utilisation d'un maillage 2D cylindrique (figure 6.11). La simplification axisymétrique du problème est justifiée par le fait que les dimensions caractéristiques de l'orifice d'injection sont beaucoup plus petites que les dimensions caractéristiques de la chambre de combustion. L'influence de la taille de la chambre de combustion sur l'écoulement induit par le jet est ainsi minimisée. Nous cherchons à reproduire avec le modèle turbulent de combustion Diesel les tendances rencontrées dans l'expérience lors du changement des paramètres décrits dans la section précédente.

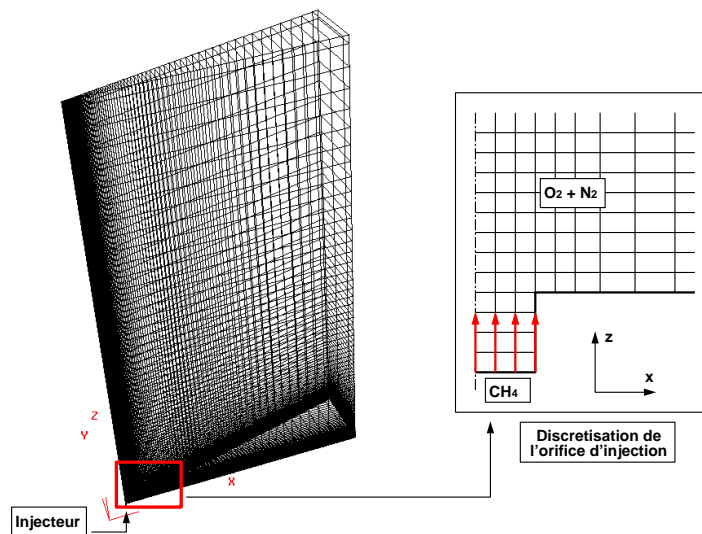


Figure 6.11 : Maillage bidimensionnel utilisé et discrétisation de la zone d'injection.

6.4.2 Discrétisation du domaine de calcul

Le fait que le carburant utilisé soit introduit dans la chambre de combustion sous forme gazeuse nous permet de ne pas traiter la modélisation d'un jet liquide. L'autre avantage de la modélisation d'écoulements gazeux est la possibilité de modélisation de l'injecteur. Le traitement numérique actuel des jets liquides (lagrangien) est fait avec l'injection de particules dans une maille de taille beaucoup plus grande que le diamètre d'injection. La dimension des particules est distribuée statistiquement. Si par contre, le composant injecté est sous forme gazeuse, il est possible selon Abraham [99] de discrétiser numériquement la section débitante. Dans tous les calculs effectués, trois mailles ont été utilisées pour décrire le rayon de la section débitante.

Dans la direction radiale, un rapport géométrique est appliqué au calcul de mailles successives. Dans cette direction, la taille de chaque maille correspond à 1.1 fois la dimension de la maille précédente (sachant que l'origine du maillage est placé au centre de la section d'injection comme représenté dans la figure 6.11). Une bonne discrétisation de la section débitante et des régions voisines est ainsi obtenue. Dans la direction axiale, le maillage est uniforme.

Les dimensions du maillage sont les mêmes dans tous les calculs réalisés:

- Diamètre (direction x): 6.2 cm,
- Longueur (direction z): 8.6 cm,
- Entrée de carburant par un tuyau cylindrique, de hauteur 0.4 cm,
- Aucune sortie du domaine n'existe.

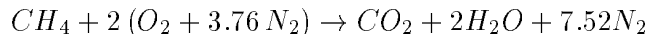
6.4.3 Calculs effectués

Nous avons d'abord effectué un calcul sans combustion. Son objectif était la comparaison des résultats numériques de calcul d'un jet de gaz instationnaire, qui pénètre dans un volume fermé à volume constant, avec les résultats expérimentaux décrits auparavant. Ensuite, des calculs d'auto-inflammation et d'établissement de flammes de diffusion ont été réalisés. Nous avons testé le comportement du modèle par rapport à différentes conditions de température et de pression dans la chambre d'admission et à des sections débitantes différentes.

Les comparaisons effectuées dans cette section doivent être interprétées en tendance et pas en niveau absolu. En effet, les résultats expérimentaux sont de simples visualisations et la présentation des résultats numériques est dépendante de la valeur des grandeurs choisies (limites inférieure et supérieure, écartement des iso-lignes, etc.). Enfin, la cinétique de réaction du méthane est calculée avec une simple loi d'Arrhenius.

Dans tous les cas, les calculs ont été initialisés en imposant des concentrations massiques d'oxygène et d'azote dans la chambre de combustion en proportions massiques égales à leurs proportions dans l'air (23.3% d'oxygène et 76.7% d'azote). La proportion d'oxygène est aussi celle rencontrée dans les expériences menées. La température initiale dans la chambre T_{ch} et la pression initiale dans la chambre p_{ch} sont des paramètres qui varient dans le calcul. Le combustible (méthane) a toujours été injecté à une température $T_{inj} = 300 K$. Les parois sont isothermes et leur température est la température imposée aux parois de la cellule pendant

les expériences (473 K). Le fait que la chimie du modèle soit simple implique que à part les espèces chimiques déjà mentionnées (CH_4 , O_2 et N_2), seuls les produits d'une combustion stœchiométrique d'un hydrocarbure sans dissociation sont produits (de l'eau et du dioxyde de carbone):



Dans le tableau 6.2, les différents paramètres utilisés dans chaque calcul sont présentés.

Calcul #	D_{inj} (cm)	T_{ch} (K)	p_{ch} (bar)	p_{inj} (bar)	Commentaire
1	0.025	453	33.3	60.0	Sans combustion
2	0.025	1200	90.0	160.0	Combustion
3	0.025	1200	90.0	110.0	Combustion

Tableau 6.2 : Paramètres des simulation effectuées.

Calcul du jet gazeux et du mélange carburant-oxydant à froid

Le premier calcul correspond à la situation où le carburant est introduit dans la chambre remplie d'oxydant suffisamment froid pour que l'auto-inflammation n'ait pas lieu. Il est important de savoir, avant d'effectuer les simulations avec combustion, si le code de calcul utilisé est capable de simuler un écoulement similaire à l'écoulement étudié expérimentalement.

La pression d'injection que nous voulons reproduire est de 60 bar. Le rapport entre la pression d'injection et la pression dans la chambre est ainsi supérieur au rapport critique pour lequel l'écoulement devient sonique (équation 6.1). Nous avons donc imposé une vitesse d'entrée du jet de 400 ms^{-1} qui est proche de la vitesse du son du méthane à une température de 300 K ($C_{\infty, CH_4} = 450 \text{ ms}^{-1}$). Sur la figure 6.12, l'évolution de la vitesse en fonction de la coordonnée axiale peut être observée à deux instants différents. Cette évolution suit la tendance rencontrée aussi par les calculs de Abraham [99].

La comparaison entre le calcul #1 et l'expérience qui lui correspond est présentés sur la figure 6.13. La question se pose de savoir parmi les grandeurs calculées par le code de calcul, laquelle sera la plus adaptée pour illustrer les contours du jet mesurés expérimentalement. La technique Schlieren met en évidence les zones à fort gradient d'indice de réfraction et donc de la température et de la densité. Il semble raisonnable de comparer aux résultats expérimentaux la température. En fait, nous pouvons indifféremment regarder les iso-contours de température ou de concentration de carburant car le nombre de Lewis dans le code de calcul est égal à 1.

Les résultats du calcul numérique montrent que le code reproduit bien la forme des contours des jets mesurés expérimentalement. La pénétration au cours du temps est la même. Dans le sens radial et sur toute sa longueur, le jet calculé est plus large que le jet mesuré. Cela peut s'expliquer en partie du fait que l'on visualise des gradients plutôt que des iso-contours. Les images du développement du jet gazeux obtenues pour des temps supérieurs à 2.0 ms, sauf rares exceptions, ne sont pas exploitables. Le jet devient très diffus et les gradients de température ne sont pas assez intenses pour que les rayons de lumière divergent différemment. Cependant, les bons résultats correspondant au début du calcul doivent se conserver pendant sa durée.

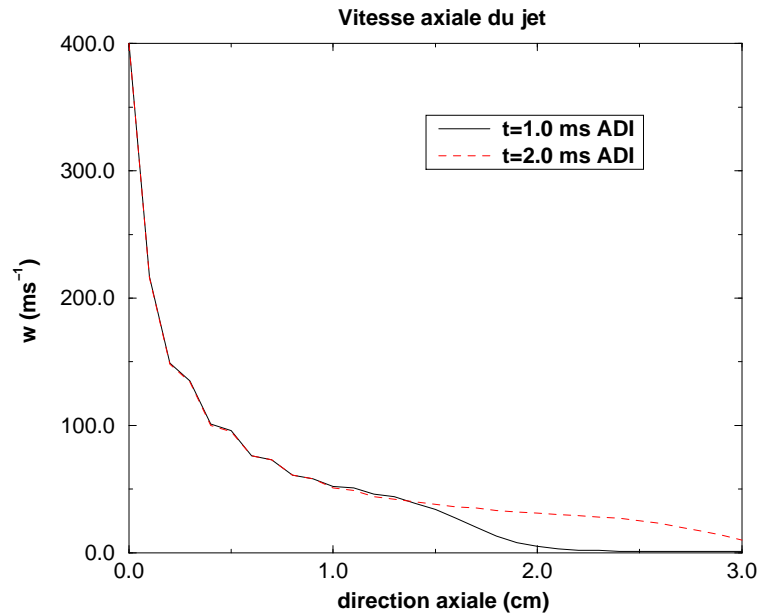


Figure 6.12 : Vitesse sur l'axe de la chambre de combustion en fonction de la coordonnée axiale ($z = 0.0$ cm représente la sortie de l'injecteur).

Calculs avec combustion: Changement de la vitesse d'injection

Nous avons étudié l'effet du changement de la vitesse d'injection sur le délai d'auto-inflammation. Comme il a été mentionné auparavant, il s'agit d'un paramètre que nous ne pouvons pas calculer exactement à partir des résultats expérimentaux obtenus. Cependant, dans le cas d'un écoulement subsonique à l'intérieur d'une tuyère, cette vitesse (ou du moins la valeur maximale dans la configuration étudiée) peut être estimée à partir de la loi de Barré de Saint Venant. Pour un écoulement isentropique d'un gaz parfait, la vitesse moyenne du gaz à la sortie de l'injecteur est obtenue en fonction des conditions thermodynamiques en amont et en aval de l'injecteur [100],

$$U = \sqrt{\frac{2\gamma}{\gamma-1} R T_{inj} \left[1 - \left(\frac{p_{ch}}{p_{inj}} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right]} \quad (6.2)$$

Si le régime de l'écoulement est sonique, il faut seulement tenir compte de l'augmentation du débit massique dû à l'augmentation de la masse volumique des gaz injectés. La seule manière de simuler cela dans le code de calcul est à travers la diminution de leur température d'entrée.

Les calculs réalisés (calculs 2 et 4 du tableau 6.2) cherchent à simuler des situations où la température et la pression dans la chambre de combustion au moment de l'injection sont élevées. Le régime étudié est toujours subsonique. Dans le cas 2, pour une pression d'injection de 160 bar, la vitesse imposée a été de 400 ms^{-1} . Dans le cas 3, la pression d'injection de 110 bar correspond environ à une vitesse moyenne d'injection de 200 ms^{-1} .

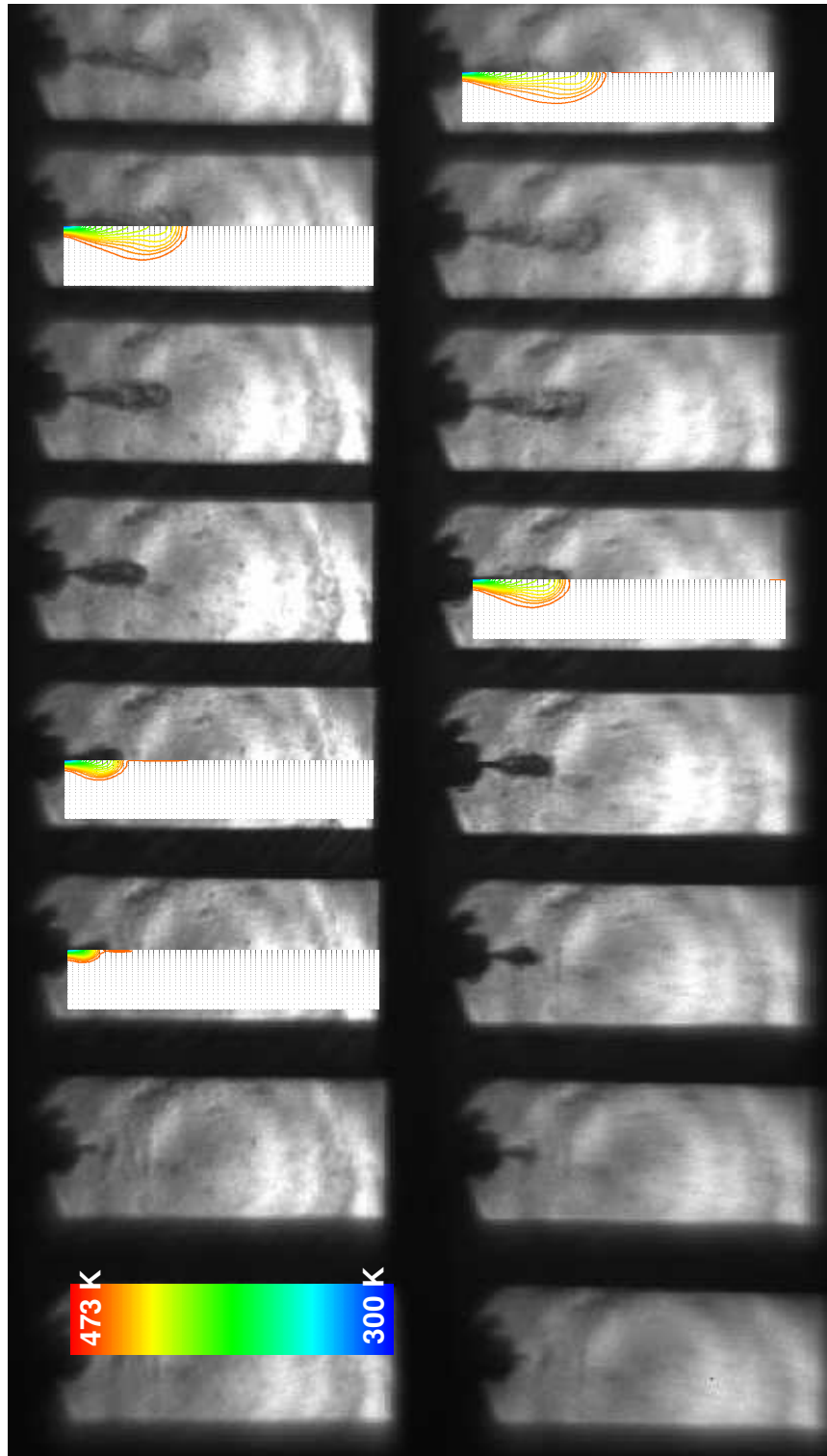


Figure 6.13 : Contours du jet de carburant obtenus par la technique Schlieren. Comparaison par rapport aux calculs réalisés avec KIVA II à travers des iso-contours de température $T_{min} = 300 K$ et $T_{max} = 473 K$. Les instants comparés sont (par rapport au temps après le début de l'injection: ADI): 1) Image 5, $t = 0.4 ms$ ADI, 2) Image 7, $t = 0.6 ms$ ADI, 3) Image 10, $t = 0.9 ms$ ADI, 4) Image 13, $t = 1.2 ms$ ADI, 5) Image 16, $t = 1.5 ms$ ADI.

Les évolutions des taux de réaction moyens intégrés dans le volume de la chambre de combustion sont présentées sur la figure 6.14. Elles y sont comparées aux signaux captés par la photo-diode. Comme dans les expériences effectuées, l'allumage est plus tardif quand la vitesse d'injection diminue. La différence entre les délais d'auto-inflammation calculés et mesurés expérimentalement est due au fait que la chimie utilisée par le modèle n'est pas représentative de la chimie réelle de l'auto-inflammation du méthane.

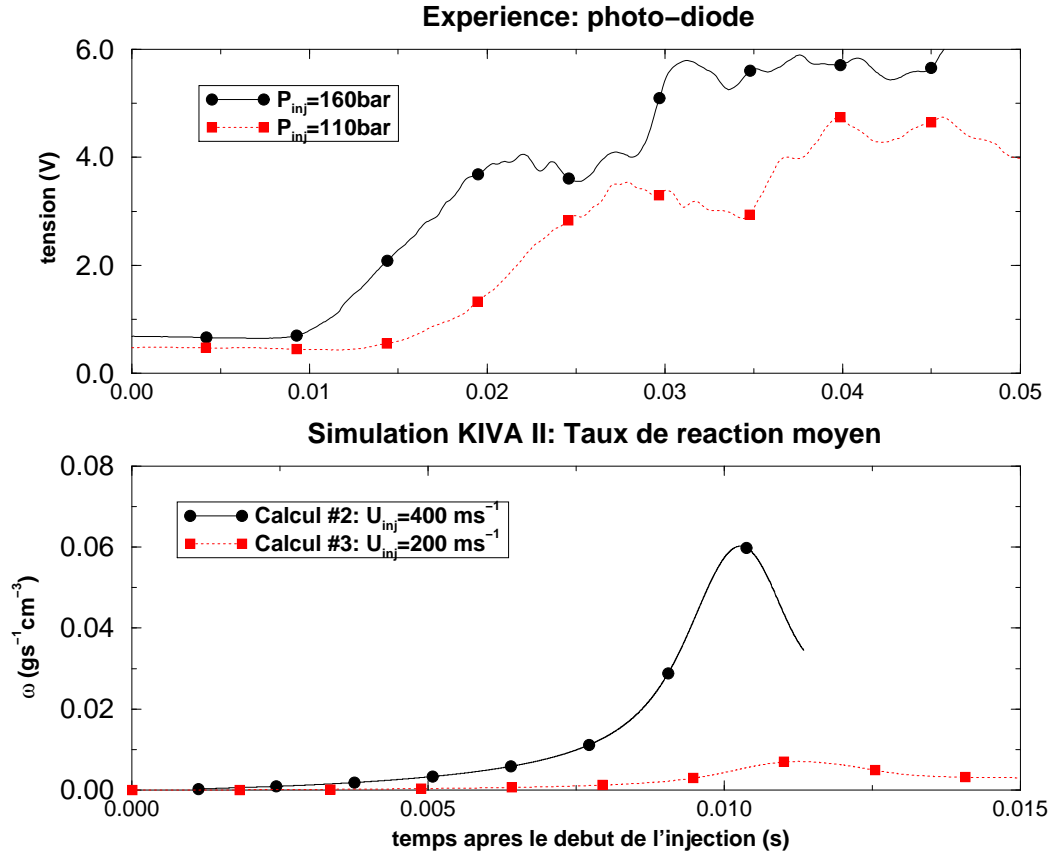


Figure 6.14 : Comparaison entre les délais d'auto-allumage mesurés expérimentalement par la photo-diode et calculés par le code KIVA II ($D_{inj} = 0.25 \text{ mm}$, $T_{ch} = 1200 \text{ K}$, $p_{ch} = 90 \text{ bar}$). Sensibilité par rapport au changement de la vitesse d'injection du méthane. Paramètres chimiques utilisés: $A = 3.0 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$ et $T_a = 15000 \text{ K}$.

Enfin, l'endroit où l'auto-inflammation a lieu ainsi que l'évolution de la flamme sont représentés sur les figures 6.15 et 6.16. La figure 6.15 présente l'évolution des iso-contours de la température au cours du temps. Comme dans les cas expérimentaux à température initiale élevée (figures 6.9 et 6.10), l'auto-inflammation a lieu quelque part environ à mi-chemin entre l'injecteur et le bout du jet ($t = 9.6 \text{ ms}$). La flamme se propage ensuite vers les directions amont et aval de l'écoulement par rapport à l'injecteur. Nous ne pouvons pas effectuer des comparaisons directes entre les grandeurs observées expérimentalement (figure 6.10) et les grandeurs calculées. En effet, la lumière émise par la flamme correspond à la combustion des suies ou à la combustion en milieu riche. Or, aucune des grandeurs chimiques calculées ne peut reproduire correctement ces émissions de lumière.

L'observation du taux de réaction (figure 6.16) montre une flamme de prémélange qui se propage à partir de l'endroit où l'auto-inflammation a lieu ($t = 9.6 \text{ ms}$) ainsi qu'une flamme de diffusion qui s'établit sur le contour stoéchiométrique de la fraction de mélange ($t = 15.6 \text{ ms}$). Il est intéressant de noter que dans cette configuration, la flamme de prémélange riche (qui se déplace vers l'injecteur) a un temps de vie long. Le taux de réaction qui lui correspond est aussi plus intense que le taux de réaction qui correspond à la flamme de diffusion à $Z = Z_{st}$.

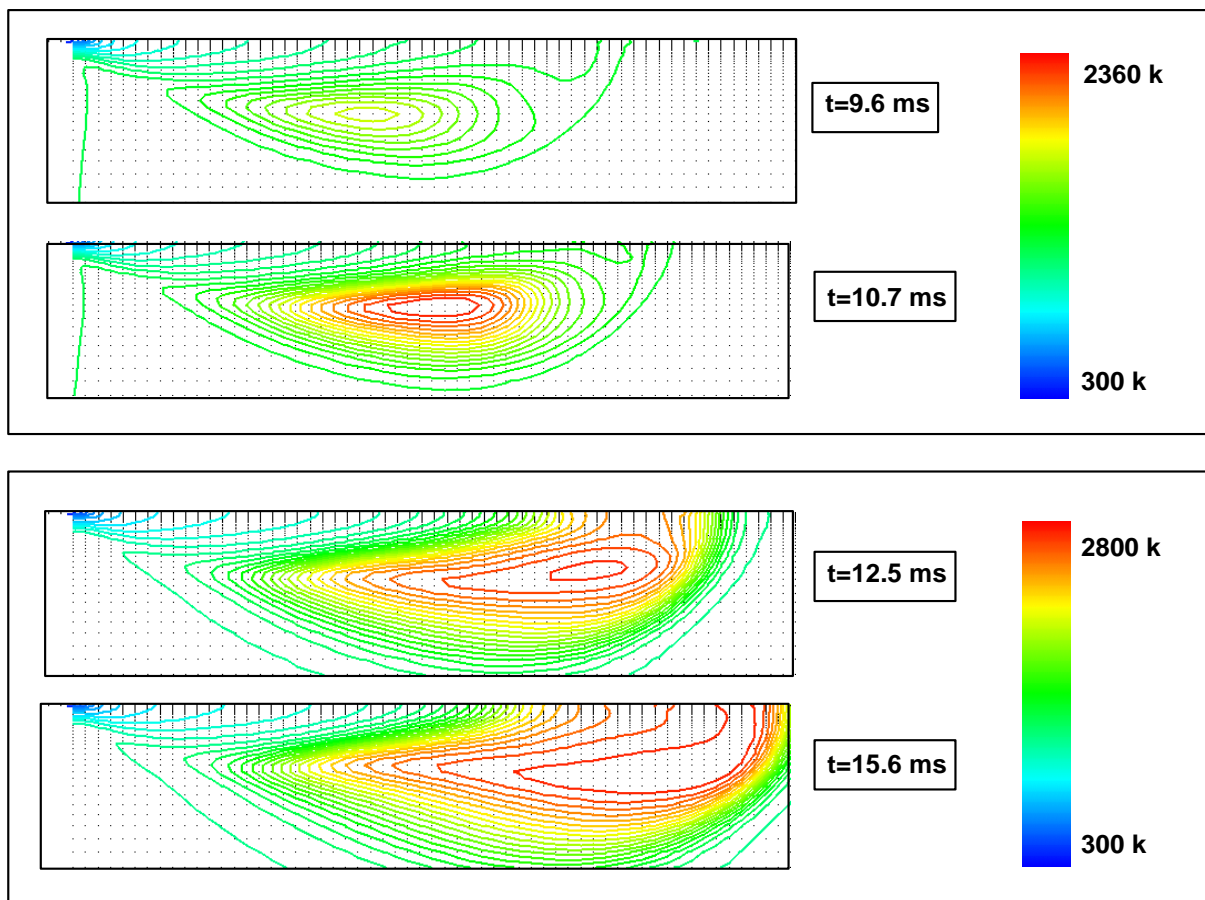


Figure 6.15 : Iso-contours de température lors de l'auto-inflammation. L'injecteur est placé en haut et à gauche de chaque image. $t = 0$ correspond au début de l'injection. Calcul 2: $D_{inj} = 0.25 \text{ mm}$, $U_{inj} = 200 \text{ ms}^{-1}$, $T_{ch} = 1200 \text{ K}$, $p_{ch} = 90 \text{ bar}$.

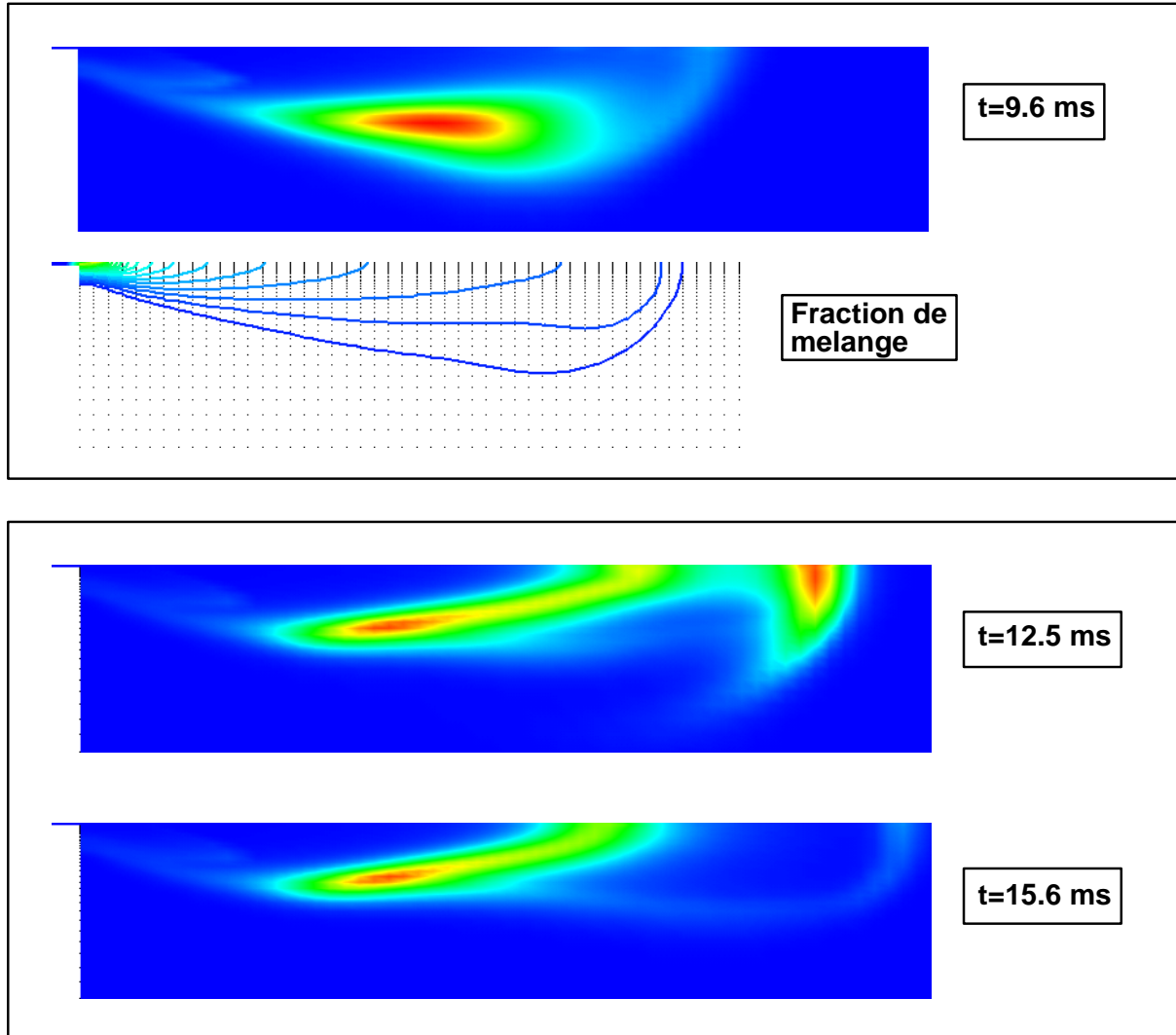


Figure 6.16 : Evolution du taux de réaction. Sur l'image du haut, l'auto-inflammation peut être localisée par rapport aux iso-contours de fraction de mélange. $t = 0$ correspond au début de l'injection. Calcul 2: $D_{inj} = 0.25$ mm, $U_{inj} = 200$ $m s^{-1}$, $T_{ch} = 1200$ K, $p_{ch} = 90$ bar.

6.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit la mise en place d'une procédure expérimentale dont l'objectif était la validation du modèle PDFA/CHI d'auto-inflammation turbulente et de combustion Diesel. Dans cette expérience, nous avons injecté du méthane à une vitesse élevée dans une chambre de combustion avec accès optique. Les conditions thermodynamiques dans la chambre avant la combustion du jet de méthane ressemblaient aux conditions rencontrées dans un moteur Diesel au moment de l'injection du carburant (température entre 900 K et 1200 K et pression entre 60 bar et 90 bar).

Plusieurs techniques ont été utilisées pour visualiser le jet de combustible gazeux, ainsi que l'auto-inflammation et la combustion du système. Des mesures et des visualisations ont été effectuées pour des températures et des pressions différentes dans la chambre de combustion au moment de l'injection.

Les données acquises nous ont servis à faire des comparaisons entre les résultats expérimentaux et les calculs numériques effectués pour une géométrie simple mais représentative de l'ensemble de la chambre de combustion et de l'injecteur. Nous avons pu étudier la forme et la pénétration du jet à la sortie de l'injecteur et pendant les premiers instants de l'injection. Nous avons aussi étudié la réponse du modèle par rapport au changement de la vitesse d'injection. Les résultats obtenus dans ce cas sont satisfaisants et correspondent aux tendances rencontrées expérimentalement.

Une base de données expérimentale a été créée. Elle peut permettre dans le futur l'étude du comportement du modèle par rapport à d'autres grandeurs comme la section débitante, la température et la pression dans la chambre de combustion ou la concentration en oxydant avant la combustion. Cette base de données doit être complétée par des mesures de la vitesse du gaz à la sortie de l'injecteur pour être utilisable.

Chapitre 7

Conclusions et perspectives

Nous avons commencé ce travail par la présentation du mécanisme complet de combustion dans les moteurs Diesel. Nous avons vu qu'il s'agit d'un processus à plusieurs étapes, faisant intervenir des phénomènes dont les temps caractéristiques peuvent être extrêmement différents.

La combustion Diesel démarre classiquement à partir d'un écoulement diphasique de carburant liquide qui est injecté à très haute vitesse dans une atmosphère oxydante à une pression et à une température élevées. La difficulté de la modélisation de cet écoulement, non totalement maîtrisée dans nos jours, nous a amené à l'étude de la combustion Diesel avec des carburants gazeux. Nous avons ainsi la possibilité de nous concentrer uniquement sur la combustion proprement dite.

Trois phases distinctes de la combustion Diesel ont alors pu être identifiées. D'abord, le mélange se forme entre le carburant et l'oxydant et est un phénomène de nature essentiellement turbulente. Le mélange ainsi produit peut subir des réactions d'auto-inflammation, où la cinétique chimique joue un rôle important. Un nombre élevé d'étapes chimiques a lieu (plusieurs centaines pour les combustibles couramment utilisés), avec l'apparition de radicaux chimiques indispensables à la propagation de la flamme. L'apparition de points d'auto-inflammation, avec une montée brusque locale du taux de réaction dépend fortement de la température du mélange. Si les pertes locales de chaleur sont supérieures à sa production en raison des réactions chimiques, l'auto-inflammation peut ne jamais s'amorcer. Le délai d'auto-inflammation dépend du temps de formation du mélange réactif et du temps caractéristique des réactions chimiques d'auto-inflammation. Lorsque la flamme s'allume, elle se propage rapidement aux réactifs mélangés entre-temps et une flamme de diffusion turbulente apparaît aux endroits où le mélange est en proportion stoechiométrique.

Les modèles classiques d'auto-allumage ne concernent en général que la composante chimique de ce processus. En effet, dans les codes de calcul d'écoulements turbulents couramment utilisés, seules les valeurs moyennes des variables de l'écoulement sont calculées. Or, il est connu que l'évaluation de la valeur moyenne du taux de réaction comme fonction des valeurs moyennes des variables de l'écoulement implique des erreurs non négligeables. Pendant l'auto-inflammation, pour que le taux de réaction soit correctement calculé, il faut déterminer le mélange turbulent entre les espèces réactives.

Des résultats de simulation numérique directe ont été utilisés pour étudier et mieux comprendre les processus de mélange, d'auto-inflammation et d'établissement des flammes de diffusion

au sein d'un écoulement turbulent. Ces résultats ont aussi permis la conception et l'étude d'un modèle d'auto-inflammation et de combustion turbulente. Le modèle d'auto-inflammation proposé utilise la méthode des *pdf* présumées pour le calcul de la valeur moyenne du taux de réaction. Il a été montré que le taux de réaction instantané est une fonction de deux variables. La première est la fraction de mélange, qui est un scalaire conservé capable de décrire l'état du mélange entre le carburant et l'oxydant; la seconde est une variable d'avancement qui traduit la transition pendant la période d'auto-allumage entre l'état de mélange non réactif et l'état où une flamme de diffusion en équilibre chimique est parfaitement établie. Des fonctions de densité de probabilité pour les deux variables sont alors présumées. Une distribution β décrit le comportement de la fraction de mélange, tandis que la variable de progrès est représentée à chaque point par sa valeur moyenne.

La flamme de diffusion est à son tour calculée par un modèle basé sur le concept de flammelles, en supposant que dès qu'elle est parfaitement établie, alors la chimie est infiniment rapide par rapport au mélange turbulent des espèces réactives. La transition entre le modèle à *pdf* pour l'auto-allumage et le modèle de flammelles pour la flamme de diffusion est assurée par une fonction continue de la variable d'avancement.

Les résultats de la simulation numérique directe ont été utilisés d'un côté pour valider les hypothèses simplificatrices du modèle et de l'autre, pour tester ses résultats. Un bon agrément a été obtenu pour un ensemble de configurations.

Le modèle complet de combustion Diesel que nous avons appelé PDFFA/CHI a été implanté dans le code de calcul d'écoulements réactifs moyens KIVA II. D'abord, il a été testé sur une version unidimensionnelle du code, avec laquelle des tests de sensibilité par rapport à plusieurs paramètres ont été réalisés. Il a été testé ensuite sur des configurations plus réalistes, proches des écoulements réactifs dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel à injection directe. Les cas simulés cherchaient à décrire l'écoulement réactif d'un jet de carburant gazeux injecté à grande vitesse dans une cellule de combustion où l'oxydant est présent à une pression et une température élevées.

Des expériences ont été réalisées dans cette configuration. Le modèle a ainsi pu être testé par rapport à des résultats expérimentaux de combustion turbulente. Même s'il n'est pas encore possible de tester quantitativement les modèles proposés, qualitativement nous avons retrouvé numériquement les tendances obtenues par les résultats expérimentaux.

Il serait intéressant dans le futur de rendre le modèle capable de reproduire exactement les délais d'auto-inflammation pour des hydrocarbures différents. Ceci n'est possible qu'en introduisant une chimie plus réaliste. Il est important aussi de tester le modèle dans des géométries complexes tridimensionnelles, représentant la chambre de combustion de moteurs Diesel. Les résultats expérimentaux de combustion du type Diesel obtenus méritent une exploitation plus profonde. Des paramètres comme la section débitante de l'injecteur, la température ou la concentration d'oxydant dans la chambre de combustion peuvent être changés et les résultats comparés aux calculs numériques de modélisation.

Annexe A

Calcul de la flamme laminaire étirée et stationnaire

On cherche à calculer et à analyser les caractéristiques des flammes de diffusion laminaires, stationnaires et étirées. La géométrie typique de ce type de flammes a pour origine l'écoulement plan de deux espèces en contre-courant (figure 2.13). Cet écoulement a une solution analytique simple pour le champ de vitesses, du type,

$$\rho u = -\Lambda \rho x \quad (\text{A.1})$$

$$\rho u = \Lambda \rho y \quad (\text{A.2})$$

où Λ est le taux détirement, supposé constant dans le domaine. Le champ de vitesses décrit par les équations A.1 et A.2, dès que compatible avec les conditions aux limites de pression, est solution de l'équation de continuité. Comme la solution ne dépend que de x et que les composantes transversales de la vitesse, ainsi que leurs gradients ne sont pas utiles, il n'est pas nécessaire de résoudre les équations de transport de la quantité de mouvement.

La simplicité caractéristique de cet écoulement permet aussi son traitement analytique lorsque l'hypothèse de chimie simple est introduite. Alors, une seule réaction a lieu dans la zone de mélange des courants de carburant et d'oxydant.

Pour une réaction chimique simple du type,



trois équations de transport sont nécessaires, une pour le carburant F , une pour l'oxydant O et une pour la température T ,

$$\rho u_k \frac{\partial Y_F}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\lambda}{C_p L_{eF}} \frac{\partial Y_F}{\partial x_k} \right) + \dot{\omega}_F \quad (\text{A.4})$$

$$\rho u_k \frac{\partial Y_O}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\lambda}{C_p L_{eO}} \frac{\partial Y_O}{\partial x_k} \right) + \dot{\omega}_O \quad (\text{A.5})$$

$$\rho u_k \frac{\partial T}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\lambda}{C_p} \frac{\partial T}{\partial x_k} \right) + \dot{\omega}_T \quad (\text{A.6})$$

Les inconnues à calculer sont, les champs de concentrations de carburant et d'oxydant, le champ de températures, la position de la flamme et sa température. Ces deux derniers paramètres ne peuvent être évalués que si certaines hypothèses sur la position de la flamme par rapport aux réactifs sont effectuées. L'hypothèse classique de l'étude des flammes de diffusion, est que la flamme se place à l'endroit où le carburant et l'oxydant sont fournis en proportion stoechiométrique,

$$r \dot{\omega}_F = \dot{\omega}_O \quad (\text{A.7})$$

Il faut remarquer qu'il y a une différence de concept entre *être* en proportion stoechiométrique et *être fourni* en proportion stoechiométrique. En effet, cette deuxième condition implique qu'il s'agit de flux de carburant et d'oxydant qui, à l'endroit où se place la flamme, sont en proportion stoechiométrique. Si la flamme est considérée infiniment mince, la première condition n'a pas de sens. Dans ce cas, à l'endroit où se place la flamme, les concentrations de carburant et d'oxydant sont nulles.

La température de la flamme peut être trouvée à partir de la solution de l'équation A.6 en remplaçant la variable x par sa valeur x_f .

A.1 Approche sans scalaire passif

On cherche à résoudre les équations A.4 à A.6 dans tout le domaine x du système. Les hypothèses simplificatrices du problème sont:

- Les nombres de Lewis associés à chaque espèce sont unitaires, $Le_F = Le_O = 1$.
- La densité est constante.
- La chimie est infiniment rapide. Cette hypothèse est fondamentale, car elle implique que la flamme a une épaisseur infinitésimale et donc, que le taux de réaction n'est nul que sur le point de l'axe $x = x_f$. Un autre résultat important est la non interaction entre la combustion et la géométrie de l'écoulement, ce qui permet l'utilisation des expressions A.1 et A.2 pour le champ de vitesses. Enfin, cette hypothèse implique aussi que le carburant et l'oxydant ne sont jamais mélangés.

A.1.1 Résolution des champs de concentrations, Y_F et Y_O

Les équations de transport des espèces sont donc homogènes (sans termes source) dans tout le domaine de calcul sauf sur le point où la flamme croise l'axe x ($x = x_f$). Elles ont la même forme que l'équation de transport du scalaire passif (équation 2.13, section 2.3.2). En substituant la vitesse u par son expression, donnée par l'équation A.1, on obtient,

$$x \frac{\partial Y_j}{\partial x} = - \frac{\lambda}{\Lambda \rho C_p} \frac{\partial^2 Y_j}{\partial x^2} \quad (\text{A.8})$$

Cette équation peut être intégrée une première fois en effectuant un changement de variables du type $\alpha = \partial Y_j / \partial x$. Le résultat de cette opération est,

$$\alpha = C \exp\left(-\frac{x^2}{2A}\right) \quad (\text{A.9})$$

où C est une constante d'intégration qui provient des conditions aux limites, et $A = \lambda / \Lambda \rho C_p$. Le résultat de la deuxième intégration de l'équation A.8 est,

$$Y_j = C_1 \sqrt{\frac{A\pi}{2}} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) + C_2 \quad (\text{A.10})$$

où C_1 et C_2 sont des constantes d'intégration qui résultent des conditions aux limites et où,

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-x^2} dx \quad (\text{A.11})$$

A.1.2 Détermination de Y_F

Si le carburant ($j = F$) est fourni du côté positif de x , alors les conditions aux limites pour la fonction Y_F sont,

$$\begin{aligned} x = x_f &: Y_F = 0 \\ x \rightarrow +\infty &: Y_F = Y_{F,0} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

Physiquement, la position x_∞ est choisie comme étant un point positionné d'un côté ou de l'autre de la flamme, suffisamment loin de celle-ci pour que l'interaction entre les deux courants de réactifs soit nulle.

Sachant que quand $x \rightarrow +\infty$, $\operatorname{erf}(x) = 1$, le résultat de Y_F est,

$$Y_F = Y_{F,0} \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)}{1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)} \quad (\text{A.13})$$

A.1.3 Détermination de Y_O

Les conditions aux limites pour la fonction Y_O sont,

$$\begin{aligned} x = x_f &: Y_O = 0 \\ x \rightarrow -\infty &: Y_O = Y_{O,0} \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Quand $x \rightarrow -\infty$, $\operatorname{erf}(x) = -1$,

$$Y_O = Y_{O,0} \frac{-\operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) + \operatorname{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)}{1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)} \quad (\text{A.15})$$

A.1.4 Détermination de la température

Côté oxydant: $x < x_f$

Les conditions aux limites pour la fonction T du côté de l'oxydant sont,

$$\begin{aligned} x = x_f : \quad T &= T_f \\ x \rightarrow -\infty : \quad T &= T_{O,0} \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

L'expression de T obtenue à partir de A.6 avec $\dot{\omega}_T = 0$ et les conditions aux limites A.16 est,

$$T = \frac{1}{1 + \operatorname{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)} \left[(T_f - T_{O,0}) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) + T_f + T_{O,0} \operatorname{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right) \right] \quad (\text{A.17})$$

Côté carburant: $x > x_f$

Les conditions aux limites pour la fonction T du côté du carburant sont,

$$\begin{aligned} x = x_f : \quad T &= T_f \\ x \rightarrow +\infty : \quad T &= T_{F,0} \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

L'expression de T dans ce cas est,

$$T = \frac{1}{\operatorname{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right) - 1} \left[(T_f - T_{F,0}) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) + T_{F,0} \operatorname{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right) - T_f \right] \quad (\text{A.19})$$

A.1.5 Détermination de la position de la flamme x_f

Quand $x = x_f$, les équations de transport des espèces chimiques et de la température ne sont plus homogènes. Les termes $\dot{\omega}_j$ deviennent donc nuls. Il faut dans ce cas tenir compte des termes sources liés à la réaction chimique (équations A.4 à A.6). L'intégration de ces équations doit être effectuée dans un domaine infinitésimal, entre x_f^- et x_f^+ (figure A.1), les positions du côté de l'oxydant et du côté du carburant les plus proches possibles de la flamme.

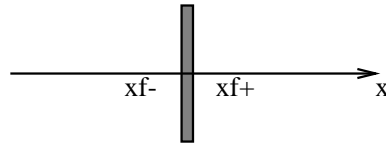


Figure A.1 : Limites d'intégration des équations différentielles de transport des espèces et de la température.

$$\int_{-}^{+} \rho u \frac{\partial Y_j}{\partial x} dx - \int_{-}^{+} \rho D \frac{\partial^2 Y_j}{\partial x^2} dx = \int_{-}^{+} \dot{\omega}_j dx \quad (\text{A.20})$$

Comme les fonctions Y_F et Y_O sont continues (ce qui n'est pas vrai pour leur gradients) la première intégrale du terme à gauche de l'équation antérieure peut être simplifiée,

$$\int_{-}^{+} \rho u \frac{\partial Y_j}{\partial x} dx = \int_{-}^{+} \rho u dY_j \quad (\text{A.21})$$

Comme la vitesse u dans le plan de la flamme est petite, ce terme peut être négligé. Il reste alors,

$$- \int_{-}^{+} \rho D \frac{\partial^2 Y_j}{\partial x^2} dx = \int_{-}^{+} \dot{\omega}_j dx \quad (\text{A.22})$$

Si on nomme le terme de droite taux de consommation massique d'une espèce par unité de surface, $\dot{\Omega}_j$,

$$\dot{\Omega}_j = \int_{-}^{+} \dot{\omega}_j dx \quad (\text{A.23})$$

l'équation A.22, quand j est remplacé par F et O devient,

$$\text{soit, } \rho D \frac{\partial Y_F}{\partial x} \Big|_{-}^{+} = -\dot{\Omega}_F \quad (\text{A.24})$$

$$\text{soit, } \rho D \frac{\partial Y_O}{\partial x} \Big|_{-}^{+} = -\dot{\Omega}_O \quad (\text{A.25})$$

En introduisant la condition A.7 qui détermine la position de la flamme, on obtient que,

$$r \rho D \frac{\partial Y_F}{\partial x} \Big|_{-}^{+} = \rho D \frac{\partial Y_O}{\partial x} \Big|_{-}^{+} \quad (\text{A.26})$$

Les dérivées de Y_F et de Y_O peuvent être calculées de chaque coté de la flamme,

$$\frac{\partial Y_F}{\partial x} = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq x_f \\ \frac{Y_{F,0}}{1 - \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)} \sqrt{\frac{2}{\pi A}} e^{-\frac{x^2}{2A}} & \text{si } x > x_f \end{cases} \quad (\text{A.27})$$

$$\frac{\partial Y_O}{\partial x} = \begin{cases} -\frac{Y_{O,0}}{1 + \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)} \sqrt{\frac{2}{\pi A}} e^{-\frac{x^2}{2A}} & \text{si } x < x_f \\ 0 & \text{si } x \geq x_f \end{cases} \quad (\text{A.28})$$

En remplaçant les expressions des dérivées dans l'équation A.26, le résultat est,

$$\text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right) = \frac{1 - \phi}{1 + \phi} \quad (\text{A.29})$$

avec

$$\phi = r \frac{Y_{F,0}}{Y_{O,0}} \quad (\text{A.30})$$

La position de la flamme est donc complètement définie à partir des concentrations de chaque espèce dans des régions suffisamment loin de la flamme.

A.1.6 Température de la flamme

Le champ de température est déterminé en fonction du champ de concentration d'une des espèces. L'équation A.6 est intégrée en prenant,

$$\dot{\omega}_T = \frac{Q}{C_p} \dot{\omega}_F \quad (\text{A.31})$$

où Q est la quantité de chaleur par unité de masse de carburant consommé (pouvoir calorifique). Il résulte alors que,

$$\int_{-}^{+} \rho u \frac{\partial T}{\partial x} dx - \int_{-}^{+} \rho D \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} dx = \int_{-}^{+} \frac{Q}{C_p} \dot{\omega}_F dx \quad (\text{A.32})$$

La première intégrale du terme de gauche de l'équation est éliminée grâce aux mêmes arguments que ceux utilisés pour l'équation de transport des espèces. Alors,

$$\lambda \left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{-}^{+} = -Q \dot{\Omega}_F \quad (\text{A.33})$$

Les dérivées $\partial T / \partial x^{+}$ et $\partial T / \partial x^{-}$ sont obtenues respectivement à partir des équations A.17 et A.19,

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|^{+} = - \frac{(1 + \phi) (T_f - T_{F,0})}{\phi \sqrt{2A\pi}} e^{-\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)^2} \quad (\text{A.34})$$

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|^{-} = \frac{(1 + \phi) (T_f - T_{O,0})}{\phi \sqrt{2A\pi}} e^{-\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)^2} \quad (\text{A.35})$$

Le calcul est alors effectué par rapport à T_f après substitution de A par sa valeur,

$$T_f = \frac{1}{(1 + \phi)} \left(T_{F,0} + \phi T_{O,0} + \frac{Q}{C_p} Y_{F,0} \right) \quad (\text{A.36})$$

A.1.7 Bibliothèques de flammelettes

L'intérêt de l'étude de flammes de diffusion laminaires en contre-courant est, comme nous l'avons vu auparavant, la création de bibliothèques de flammelettes à partir de configurations simples et représentatives des systèmes réels. Le modèle de flamme cohérente par exemple (chapitre 2.4), fait appel au calcul d'une vitesse de consommation des réactifs. Quand le modèle est appliqué au calcul des flammes de prémélange, cette vitesse est en général identifiée avec la vitesse de propagation laminaire de la flamme. Plusieurs études ont été menées sur la modélisation de cette grandeur [79, 101] dont le calcul est bien maîtrisé. A l'inverse, avec les flammes de diffusion, la première difficulté rencontrée est précisément la définition de la vitesse de consommation des réactifs à travers le front de flamme. En effet, une flamme de diffusion n'a pas de vitesse propre. Elle est contrôlée par le mélange entre le carburant et l'oxydant et sa localisation est connue à priori grâce à des raisonnements de nature

thermodynamique Dans le cadre de la combustion non prémélangée, il faut plutôt définir un taux de consommation massique par unité de surface de flamme qui peut être identifié au paramètre $\dot{\Omega}_j$ de l'équation A.23. Son calcul est effectué à l'aide des équations A.24 et A.25 pour le carburant et pour l'oxydant respectivement. Les dérivées de Y_F et de Y_O ont été calculées en A.27 et A.28. En remplaçant en A.24 et en utilisant la condition A.7, il vient que,

$$\dot{\Omega}_F = \rho V_F = \rho Y_{F,0} \sqrt{\frac{D \Lambda}{2\pi}} \frac{1 + \phi}{\phi} e^{-w^2} \quad (\text{A.37})$$

$$\dot{\Omega}_O = \rho V_O = r \rho V_F \quad (\text{A.38})$$

où w est définie par,

$$w = \text{erf}^{-1} \left(\frac{1 - \phi}{1 + \phi} \right) \quad (\text{A.39})$$

A.1.8 Résumé des résultats importants

Hypothèses du calcul:

- Ecoulement incompressible,
- Ecoulement stationnaire,
- Ecoulement laminaire sans prémélange dans les courants de carburant et d'oxydant,
- Nombres de Lewis caractéristiques du carburant et de l'oxydant égaux à 1,
- Chimie infiniment rapide.

Résultats du calcul

- Champ de concentrations du carburant,

$$Y_F = \begin{cases} 0 & \text{si } x \leq x_f \\ Y_{F,0} \frac{\text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) - \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)}{1 - \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)} & \text{si } x > x_f \end{cases} \quad (\text{A.40})$$

- Champ de concentrations de l'oxydant,

$$Y_O = \begin{cases} Y_{O,0} \frac{-\text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) + \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)}{1 + \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)} & \text{si } x < x_f \\ 0 & \text{si } x \geq x_f \end{cases} \quad (\text{A.41})$$

- Champ de températures,

$$T = \begin{cases} \frac{1}{1 + \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right)} \left[(T_f - T_{O,0}) \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) + T_f + T_{O,0} \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right) \right] & \text{si } x < x_f \\ \frac{1}{\text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right) - 1} \left[(T_f - T_{F,0}) \text{erf}\left(\frac{x}{\sqrt{2A}}\right) + T_{F,0} \text{erf}\left(\frac{x_f}{\sqrt{2A}}\right) - T_f \right] & \text{si } x \geq x_f \end{cases} \quad (\text{A.42})$$

- Position de la flamme,

$$x_f = \sqrt{2A} \operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{1 - \phi}{1 + \phi} \right) \quad (\text{A.43})$$

avec

$$\phi = r \frac{Y_{F,0}}{Y_{O,0}} \quad (\text{A.44})$$

$$A = \frac{\lambda}{\Lambda \rho C_p} \quad (\text{A.45})$$

- Température de la flamme,

$$T_f = \frac{1}{(1 + \phi)} \left(T_{F,0} + \phi T_{O,0} + \frac{Q}{C_p} Y_{F,0} \right) \quad (\text{A.46})$$

- Vitesse de consommation du carburant et de l'oxydant,

$$V_F = Y_{F,0} \sqrt{\frac{D \Lambda}{2\pi} \frac{1 + \phi}{\phi}} e^{-w^2} \quad (\text{A.47})$$

$$V_O = r V_F \quad (\text{A.48})$$

avec,

$$w = \operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{1 - \phi}{1 + \phi} \right) \quad (\text{A.49})$$

- Courbes qui représentent les évolutions A.40, A.41 et A.42,

A.2 Calculs à partir d'un scalaire passif

A.2.1 Détermination de Y_F et de Y_O

Les expressions A.13 et A.15 peuvent être aussi déterminées en fonction d'un scalaire passif comme la fraction de mélange. L'équation A.8 est alors intégrée en remplaçant Y_j par Z . La définition de la fraction de mélange (équation 2.17) impose au résultat de l'intégration (équation A.10) les conditions aux limites suivantes:

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty : Z &= 0 \\ x \rightarrow +\infty : Z &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.50})$$

Le résultat est,

$$Z = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2A}} \right) + 1 \right] \quad (\text{A.51})$$

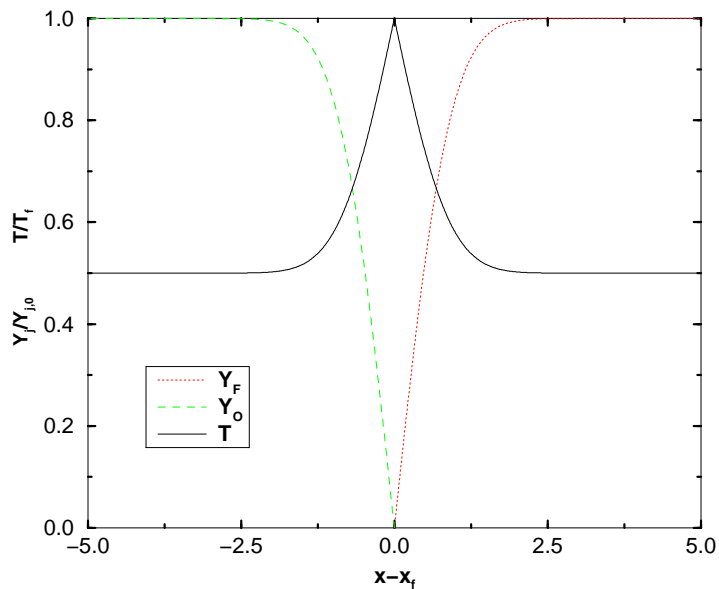


Figure A.2 : Evolutions de Y_F , Y_O et de T dans les conditions: $T_{F,0} = T_{O,0} = T_f/2$.

En remplaçant la valeur de Z dans les équations 2.21 et 2.22, les résultats A.13 et A.15 sont retrouvés.

A.2.2 Détermination de la position de la flamme x_f

La position de la flamme peut aussi être retrouvée en fonction de la valeur de la fraction de mélange évaluée à chaque point de l'écoulement. En introduisant encore une fois la condition A.7, l'équation A.26 est de nouveau obtenue. Comme Y_F et Y_O ne sont connues qu'en fonction de Z , il faut calculer leurs dérivées par rapport à cette variable. Le résultat est,

$$r \frac{\partial Y_F}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x} \Big|_{-}^{+} = \frac{\partial Y_O}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x} \Big|_{-}^{+} \quad (\text{A.52})$$

ce qui peut être simplifié par,

$$r \frac{\partial Y_F}{\partial Z} \Big|_f = - \frac{\partial Y_O}{\partial Z} \Big|_f \quad (\text{A.53})$$

car Z est une fonction continue et donc, sa dérivée est égale d'un côté et de l'autre de la flamme. Le signe négatif apparaît parce que les deux intégrations sont effectuées en sens inverse d'une par rapport à l'autre.

Après la substitution de Y_F et de Y_O par leurs expressions respectives 2.21 et 2.22, et en introduisant ϕ , définie par l'équation A.30, il vient que,

$$\frac{\phi}{1 - Z_{st}} = \frac{1}{Z_{st}} \quad (\text{A.54})$$

La valeur de Z sur la flamme (Z_{st}) est donnée par A.51. Le calcul aboutit au même résultat que celui retrouvé dans l'expression A.29.

Les mêmes résultats ont été obtenus par deux méthodes différentes. La simplicité du problème résolu a permis de démontrer l'équivalence entre les deux mécanismes de calcul de la flamme de diffusion. Le choix de l'un ou de l'autre dans la résolution de problèmes plus compliqués va dépendre de leur nature. Souvent, il n'est pas facile de retrouver les expressions analytiques des grandeurs thermochimiques en fonction des scalaires conservés. D'autre part, la condition de saut imposée au calcul en fonction de Y_F et de Y_O n'est toujours pas évidente.

A remarquer enfin que la température de la flamme, elle aussi, pourrait être déterminée par l'approche des scalaires conservés. Pour cela, il est nécessaire de calculer le champ de températures en fonction de Z .

A.3 Calculs à densité variable

De manière à ne pas être obligé de résoudre les équations de transport du carburant A.4 et de l'oxydant A.5 à densité variable, nous utilisons ici des résultats de Cuenot [60]. L'objectif est toujours la détermination des vitesses de consommation du carburant et de l'oxydant caractéristiques de la flamme de diffusion laminaire étirée avec écoulement des réactifs en contre-courant.

L'équation A.24 implique la détermination de la dérivée $\partial Y_F / \partial x$. En ce qui concerne le terme ρD , il doit être évalué du côté du carburant, car la densité n'est plus constante.

Dans (Cuenot, tableau 1) il est démontré que pour $Le_F = Le_O = 1$ les scalaires passifs sont obtenues en fonction des concentrations de carburant et d'oxydant par,¹

$$Z = -2 \left(\frac{\phi Y_F / Y_{F,0} - Y_O / Y_{O,0}}{\phi + 1} + \frac{\phi - 1}{\phi + 1} \right) \quad (\text{A.55})$$

Comme l'hypothèse de chimie infiniment rapide est toujours imposée, le carburant et l'oxydant ne se mélangent jamais, il en résulte que,

$$Z = -\frac{2}{\phi + 1} \left(\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} + \phi - 1 \right) \quad (\text{A.56})$$

La dérivée $\partial Y_F / \partial x$ peut être évaluée à partir de l'équation A.56 et de l'expression explicite de $Z(x)$,

$$Z = \text{erf} [\eta(x) + \omega] \quad (\text{A.57})$$

avec,

$$\eta(x) = \sqrt{\left(\frac{\Lambda \rho C_p}{2\lambda} \right)_f} \int_{x_f}^x \frac{\rho(x^*)}{\rho_f} dx^* \quad (\text{A.58})$$

¹Attention: Cuenot utilise les conditions aux limites suivantes pour la fraction de mélange: $x \rightarrow -\infty$, $Y_F = Y_{F,0}$, $Z = -1$; $x \rightarrow +\infty$, $Y_O = Y_{O,0}$, $Z = +1$.

En calculant les différents termes,

$$\rho_F D_F \left. \frac{\partial Y_F}{\partial x} \right|_f = \rho_F D_F \left. \frac{\partial Y_F}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial x} \right|_f = -\rho_F D_F \frac{Y_{F,0}}{2} \frac{\phi + 1}{\phi} \left. \frac{\partial Z}{\partial x} \right|_f \quad (\text{A.59})$$

$$\left. \frac{\partial Z}{\partial x} \right|_f = \left. \frac{\partial Z}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right|_f = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-(\eta+\omega)^2} \left. \frac{\partial \eta}{\partial x} \right|_f \quad (\text{A.60})$$

$$\left. \frac{\partial \eta}{\partial x} \right|_f = \sqrt{\frac{\Lambda \rho C_p}{2\lambda}} \frac{\rho_F}{\rho_f} \quad (\text{A.61})$$

Le résultat final est donc,

$$\dot{\Omega}_F = -\rho_F D_F \left. \frac{\partial Y_F}{\partial x} \right|_f = \frac{\rho_F^2 D_F}{\rho_f} Y_{F,0} \frac{\phi + 1}{\phi} \sqrt{\frac{\Lambda}{2D\pi}} e^{-\omega^2} \quad (\text{A.62})$$

Dans une chambre de combustion, si le nombre de Mach est inférieur et éloigné de l'unité ($Ma \ll 1$), la pression peut être considérée comme constante dans toute la chambre. Ceci permet de considérer $\rho_F^2 D_F \sim C_{te}$ et donc, de remplacer le terme $\rho_F^2 D_F$ par sa valeur à la flamme, $(\rho^2 D)_f$. Ce résultat provient de la déduction du coefficient de diffusivité moléculaire entre deux espèces à travers la théorie cinétique des gaz [18].

La vitesse de consommation du carburant est donc,

$$\dot{\Omega}_F = \rho_f Y_{F,0} \sqrt{\frac{D \Lambda}{2\pi}} \frac{1 + \phi}{\phi} e^{-\omega^2} \quad (\text{A.63})$$

La forme de cette équation est équivalente à celle qui a été obtenue avec la densité constante (équation A.37). La seule différence vient précisément du terme de densité qui doit être ici évalué sur la flamme.

A.4 Vitesses caractéristiques à travers la surface de contact

Le schéma de calcul utilisé pour la détermination de la bibliothèque de flammellettes caractéristique de la flamme de diffusion est aussi appliqué aux calculs de la vitesse de diffusion des réactifs à travers la surface de contact. Le phénomène se résume maintenant à la résolution des équations de transport du carburant et de l'oxydant pour la géométrie de la figure 2.13 sans réaction chimique.

Les équations à résoudre ont toujours la forme de l'équation A.8 mais elles sont maintenant valables dans tout le domaine de calcul. La solution est du type A.10. Les conditions aux limites sont par contre différentes de celles du problème avec combustion. Il n'y a pas de discontinuité de la solution de Y_F et de Y_O .

Pour déterminer Y_F les conditions aux limites sont :

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty : Y_F &= 0 \\ x \rightarrow +\infty : Y_F &= Y_{F,0} \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

et pour déterminer Y_O :

$$\begin{aligned} x \rightarrow -\infty : Y_O &= Y_{O,0} \\ x \rightarrow +\infty : Y_O &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.65})$$

ce qui permet de déterminer les constantes de chaque équation.

Les résultats sont :

$$Y_F = \frac{Y_{F,0}}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2A}} \right) + 1 \right] \quad (\text{A.66})$$

$$Y_O = \frac{Y_{O,0}}{2} \left[-\operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2A}} \right) + 1 \right] \quad (\text{A.67})$$

et peuvent être observés sur la figure A.3.

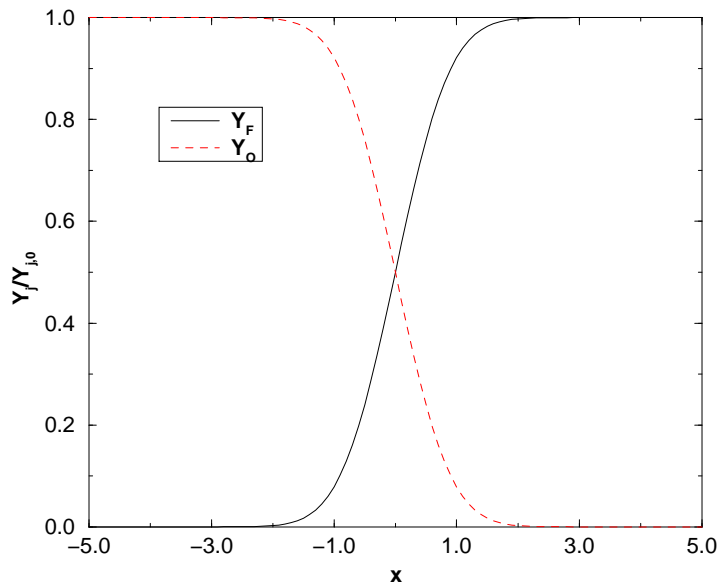


Figure A.3 : Evolutions de Y_F et de Y_O sans réaction chimique.

Pour calculer la vitesse de diffusion d'une espèce à travers la surface de contact, il faut d'abord définir où cette surface doit être placée. Supposons qu'elle se place dans les endroits où la richesse du mélange est ϕ' ($\phi' \neq \phi$, étant ϕ la richesse définie par rapport aux concentrations de carburant et d'oxydant suffisamment loin de la zone de mélange, équation A.30). La condition qui permet alors la détermination de $x(\phi')$ est,

$$\frac{Y_O [x(\phi')]}{Y_F [x(\phi')]} = \frac{r}{\phi'} \quad (\text{A.68})$$

La vitesse de diffusion d'une espèce à travers la surface placée à $x(\phi')$ est définie par,

$$V|_{x(\phi')} = D \left. \frac{\partial Y}{\partial x} \right|_{x(\phi')} \quad (\text{A.69})$$

En remplaçant Y par Y_F ,

$$V_F|_{x(\phi')} = Y_{F,0} \sqrt{\frac{D\Lambda}{2\pi}} e^{-w^2} \quad (\text{A.70})$$

et Y par Y_O ,

$$V_O|_{x(\phi')} = -Y_{O,0} \sqrt{\frac{D\Lambda}{2\pi}} e^{-w^2} \quad (\text{A.71})$$

où,

$$w = \operatorname{erf}^{-1} \left(\frac{1 - \frac{\phi}{\phi'}}{1 + \frac{\phi}{\phi'}} \right) \quad (\text{A.72})$$

Annexe B

Implantation et calculs avec le modèle 3CFM

B.1 introduction

L'implantation du modèle 3CFM dans le code KIVA II MB est étudiée en complément de sa description dans la section 2.5. Les équations du modèle sont d'abord présentées. Ensuite, des tests de sensibilité du modèle sont réalisés. Les paramètres testés sont le maillage, la valeur des différentes constantes liées aux termes modélisés, l'initialisation de la surface de contact et l'initialisation de la turbulence.

Les objectifs à atteindre sont:

- La simplification maximale de la géométrie et des conditions initiales, sans pour autant négliger les principales caractéristiques de fonctionnement des moteurs Diesel.
- La minimisation des temps de calcul, ce qui implique l'utilisation d'un faible nombre de mailles. Ceci est effectué à l'aide d'une description du domaine par un maillage bidimensionnel cylindrique.
- Le découplage du traitement du jet liquide de carburant et de la combustion. Pour cela, une configuration à injection de carburant gazeux dans la chambre de combustion est utilisée.

B.2 Equations du modèle 3CFM

B.2.1 Transport des espèces réactives

Les équations de Navier-Stokes et les équations de k et de ϵ sont résolues. Les valeurs moyennes des champs de pression, vitesse, énergie cinétique turbulente et son taux de dissipation sont calculées. Simultanément, il faut déterminer les distributions moyennes des différentes espèces intervenantes, ainsi que de la température.

Equations moyennes de transport des espèces chimiques

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_j}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_k \tilde{Y}_j}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_j} \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial x_k} \right) + \bar{\omega}_j \quad (\text{B.1})$$

Les espèces qui interviennent sont ($j = 1..8$):

1. Carburant non mélangé (n-heptane - C_7H_{16})
2. Oxydant non mélangé (oxygène - O_2)
3. Carburant mélangé (n-heptane - C_7H_{16})
4. Oxydant mélangé (oxygène - O_2)
5. Azote - N_2
6. Dioxyde de carbone - CO_2
7. Eau - H_2O
8. Espèce radicalaire

La somme des concentrations des espèces 1 et 3 fournit la concentration totale de carburant. De même, la somme des concentrations des espèces 2 et 4 fournit la concentration totale d'oxydant,

$$\tilde{Y}_F = \tilde{Y}_1 + \tilde{Y}_3 \quad (\text{B.2})$$

$$\tilde{Y}_O = \tilde{Y}_2 + \tilde{Y}_4 \quad (\text{B.3})$$

Equation moyenne de transport de l'énergie interne

L'énergie interne permet de calculer le champ de température à partir de relations issues de l'étude des gaz parfaits. L'équation moyenne de transport de l'énergie interne est l'équation 5 de la référence [91]. On ne s'intéresse qu'à la modélisation du terme de production dû aux réactions chimiques \bar{Q}_c .

B.2.2 Modélisation des taux de réaction moyens

Il faut distinguer trois phases différentes du processus de calcul: Le mélange turbulent, l'allumage et la combustion complètement développée.

Le mélange turbulent

Le carburant et l'oxydant prémélangés sont produits respectivement à partir du carburant pur injecté dans la chambre et de l'oxydant pur y existant. Les termes sources associés aux quatre équations en étude (équation B.1 avec $j = 1..4$) sont modélisés à partir de la formulation du modèle de flamme cohérente, en multipliant la vitesse de consommation associée à chaque réactif par la densité de surface de contact. Pour les espèces 1 et 2 (espèces non prémélangées),

$$\bar{\omega}_d = -\bar{\rho} V_c \Sigma_c \quad (\text{B.4})$$

et pour les espèces 3 et 4 (prémélangées),

$$\bar{\omega}_p = -\bar{\omega}_d \quad (\text{B.5})$$

L'équation moyenne de transport de la surface de contact s'écrit,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma_c}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_k \Sigma_c}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_c} \frac{\partial \Sigma_c}{\partial x_k} \right) + \alpha_c \Lambda \Sigma_c + \\ &- 2 \alpha_c (\Lambda - \Lambda_{ec}) h (\Lambda - \Lambda_{ec}) \Sigma_c - \beta_c \left(\frac{V_{cF}}{\tilde{X}_{dF}} + \frac{V_{cO}}{\tilde{X}_{dO}} \right) \Sigma_c^2 + R_c \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

La vitesse de consommation des espèces à travers la surface de contact s'écrit,

$$V_F|_{x(\phi')} = Y_{F,0} \sqrt{\frac{D \Lambda}{2\pi}} e^{-w^2} \quad (\text{B.7})$$

$$w = er f^{-1} \left(\frac{1 - \frac{\phi}{\phi'}}{1 + \frac{\phi}{\phi'}} \right) \quad (\text{B.8})$$

où ϕ' est la richesse à laquelle se trouve la surface de contact (dans le cas implanté, $\phi' = 1$) et ϕ est la richesse du mélange calculée à partir des concentrations de carburant et d'oxydant suffisamment loin de la zone de mélange,

$$\phi' = r \frac{\tilde{Y}_F [x(\phi')]}{\tilde{Y}_O [x(\phi')]} \quad (\text{B.9})$$

$$\phi = r \frac{Y_{F,0}}{Y_{O,0}} \quad (\text{B.10})$$

Le carburant et l'oxydant diffusent à travers la surface de contact en proportion stoechiométrique,

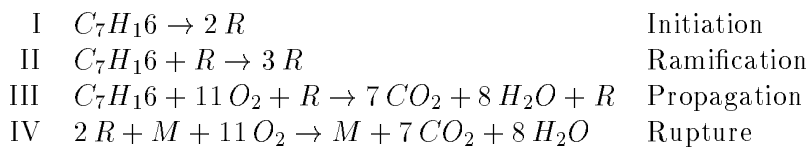
$$V_O|_{x(\phi')} = r V_F|_{x(\phi')} \quad (\text{B.11})$$

Le terme R_c fait le couplage entre l'apparition de la surface de flamme de prémélange et la disparition de la surface de contact,

$$R_c = -\gamma \frac{S_l}{\tilde{X}_u} \Sigma_p^2 \quad (\text{B.12})$$

L'auto-allumage

Le modèle cinétique de l'IFP conçu par Zellat et Zeller [2] a été utilisé. Il s'agit d'un modèle à quatre étapes dont chacune représente une des étapes du cycle de formation des radicaux chimiques,



R désigne une espèce radicalaire et M désigne une espèce quelconque.

Le taux de réaction associé au carburant est calculé pour chaque étape à partir de l'expression,

$$\dot{\omega}_i = K_i \prod_{1 \leq j \leq N} \left[\frac{\rho_j}{W_j} \right]^{a_i} \quad (\text{B.13})$$

$$K_i = A_i T^{b_i} e^{-\frac{T_{a_i}}{T}} \quad (\text{B.14})$$

L'indice i représente chacune des réactions étudiées et l'indice j correspond aux réactifs combustibles dans chaque étape (carburant pur aux radicaux).

Le taux de réaction de l'étape de ramification est corrigé par,

$$g = e^{-2\phi} \quad (\text{B.15})$$

La valeur des différents coefficients est résumée dans le tableau B.1,

Etape	A_i	a_{iF}	a_{iR}	b_i	$T_{a_i} (K)$
I	1	1	–	1	50000
II	7.94×10^{11}	1.3	0.8	0.5	17000
III	3.51×10^9	0.5	1	1	5000
IV	2.37×10^{15}	–	2	–0.5	0

Tableau B.1 : Constantes du schéma cinétique à 4 étapes IFP.

Dans l'étape de rupture, le terme ρ_M/W_M est considéré constant et est inclus dans le terme A_{IV} .

Le taux de réaction total pour une espèce j quelconque est la somme des quatre taux de réactions élémentaires de chaque réaction i ,

$$\dot{\omega}_j = \sum_{1 \leq i \leq 4} \nu_j \dot{\omega}_i \quad (\text{B.16})$$

La combustion complètement développée

Le modèle de flamme cohérente est utilisé pour le calcul des flammes de diffusion et des flammes de prémélange, ainsi,

$$\bar{\omega}_{d_j} = -\bar{\rho} V_{d_j} \Sigma_d \quad (\text{B.17})$$

pour les espèces non prémélangées et,

$$\bar{\omega}_{p_j} = \bar{\rho}_j u V_{p_j} \Sigma_p \quad (\text{B.18})$$

pour les espèces prémélangées.

Les différents termes qui apparaissent dans les équations B.17 et B.18 sont ensuite présentés. Σ_d et Σ_p sont calculés à l'aide de leurs équations de transport,

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Sigma_d}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_k \Sigma_d}{\partial x_k} &= \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_d} \frac{\partial \Sigma_d}{\partial x_k} \right) + \alpha_d \Lambda \Sigma_d + \\ &- 2 \alpha_d (\Lambda - \Lambda_{ed}) h (\Lambda - \Lambda_{ed}) \Sigma_d - \beta_d \left(\frac{V_{dF}}{\tilde{X}_{dF}} + \frac{V_{dO}}{\tilde{X}_{dO}} \right) \Sigma_d^2 + R_d \end{aligned} \quad (\text{B.19})$$

$$\frac{\partial \Sigma_p}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{u}_k \Sigma_p}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(\frac{\mu_t}{\sigma_p} \frac{\partial \Sigma_p}{\partial x_k} \right) + \alpha_p \Lambda f \left(\frac{l_t}{l_f}, \frac{\tilde{u}''}{S_l} \right) \Sigma_p - \beta_p \frac{S_l}{\tilde{X}_u} \Sigma_p^2 + R_{al} \quad (\text{B.20})$$

La vitesse de consommation du carburant par la flamme de diffusion V_F est,

$$V_F = Y_{F,0} \sqrt{\frac{D \Lambda}{2\pi} \frac{1 + \phi}{\phi}} e^{-w^2} \quad (\text{B.21})$$

et la vitesse de consommation de l'oxydant est $V_O = r V_F$.

En ce qui concerne la vitesse de consommation des espèces en prémélange, elle est identifiée avec la vitesse de propagation de la flamme laminaire dans les conditions de pression et de température proches de celles des gaz prémélangés $V_{pF} = S_l$ et $V_{pO} = r S_l$. La vitesse S_l est déterminée à l'aide des formules empiriques de Metghalchi et Keck pour l'iso-Octane [79],

$$S_l = S_{l0} \left(\frac{T(K)}{298} \right)^{\alpha'} p^{\beta'} \quad (\text{B.22})$$

$$S_{l0} = 26.32 - 84.72 (\phi - 1.13)^2 \quad (\text{B.23})$$

$$\alpha' = 2.18 - 0.8 (\phi - 1) \quad (\text{B.24})$$

$$\beta' = -0.16 + 0.22 (\phi - 1) \quad (\text{B.25})$$

La pression P est la pression moyenne dans la maille de calcul. Par contre, la température moyenne de la maille pendant la combustion est très loin de la température des gaz frais. Comme en ce moment, il n'est pas possible, dans KIVA, d'évaluer la température des gaz frais, un artifice de calcul doit être utilisé pour l'effet. Ainsi, lors du premier allumage, la température et la pression dans chaque maille sont fixées (T_0 et P_0). La température des gaz frais est estimée comme si les gaz subissaient une évolution isentropique depuis les valeurs de référence jusqu'à la pression moyenne de la maille.

$$T_u = T_0 \left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} \quad (\text{B.26})$$

Le coefficient $\gamma = C_p - C_v$ est calculé à chaque pas de temps par KIVA en fonction de la température de la maille.

La richesse ϕ qui intervient dans les équations B.23 à B.25 ne doit pas être confondue avec la richesse calculée auparavant (équation B.10). Cette dernière est définie à partir des concentrations des gaz prémélangés dans la maille, tandis que la première fait intervenir les gaz non prémélangés.

La fonction $f\left(\frac{l_t}{l_f}, \frac{\tilde{u}''}{S_l}\right)$ utilisée pour le calcul de l'éirement turbulent est issue du modèle ITNFS [52]. Les différents termes qui y interviennent sont calculés à partir des expressions suivantes:

Vitesse turbulente caractéristique,

$$\tilde{u}'' = \sqrt{\frac{2}{3}k} \quad (\text{B.27})$$

Epaisseur de flamme laminaire,

$$l_f = 2 \frac{(\lambda/C_p)_b}{\bar{\rho}_u S_l} \quad (\text{B.28})$$

où b indique les gaz brûlés et u indique les gaz frais.

Longueur turbulente caractéristique,

$$l_t = 0.42 \frac{k^{\frac{3}{2}}}{\epsilon} \quad (\text{B.29})$$

Enfin, on calcule la densité des gaz prémélangés $\bar{\rho}_{i\,pm}$ (ou densité de gaz frais $\bar{\rho}_{i\,u}$),

$$\bar{\rho}_{i\,pm} = \frac{M_{i\,pm}}{V_{pm}} \quad (\text{B.30})$$

où $M_{i\,pm}$ est la masse prémélangée de l'espèce i et V_{pm} est le volume occupé par les gaz prémélangés.

Le terme R_d fait le couplage entre la flamme de prémélange et la flamme de diffusion qu'il sert aussi à initialiser,

$$R_d = \gamma \frac{S_l}{\tilde{X}_u} \Sigma_p^2 \quad (\text{B.31})$$

La constante γ n'a aucune relation avec le coefficient thermodynamique de l'équation B.26.

Le terme R_{al} sert à initialiser la densité de surface de flamme de prémélange. Lorsque dans une maille les conditions d'auto-allumage se vérifient, R_{al} prend la valeur,

$$R_{al} = \frac{Q M_F}{h_F^0} \frac{1}{\rho_u S_l} \frac{1}{\Delta t^2} \quad (\text{B.32})$$

Nomenclature Symboles romains

M_F	Masse molaire du carburant
Q	Energie dégagée pendant la réaction chimique par unité de volume
h_F^0	Chaleur de réaction du carburant par unité de mol
R_{al}	Terme de couplage dans l'équation de transport de la densité de surface de flamme de prémélange
Δt	Pas de temps de calcul
S_l	Vitesse de flamme laminaire

Symboles grecs

$\dot{\omega}_F$	taux de réaction pour le carburant
ρ_F	masse volumique de carburant par rapport à la quantité totale de gaz prémélangé
Σ_p	densité de surface de flamme de prémélange

Séquence de calcul

La quantité d'énergie par unité de volume, libérée pendant un intervalle de temps Δt , lors d'une réaction chimique est,

$$Q = \frac{h_F^0}{M_F} \dot{\omega}_F \Delta t \quad (\text{B.33})$$

Si le modèle de flamme cohérente est utilisé pour le calcul du taux de réaction moyen $\bar{\omega}_F$, alors,

$$\bar{\omega}_F = \rho_F S_l \Sigma_p \quad (\text{B.34})$$

En remplaçant dans B.33 $\bar{\omega}_F$ par B.34, la valeur de la densité de surface de flamme de prémélange Σ_p peut être calculée en fonction du dégagement d'énergie par unité de volume pendant l'auto-allumage Q ,

$$\Sigma_p = \frac{Q M_F}{h_F^0} \frac{1}{\rho_u S_l} \frac{1}{\Delta t} \quad (\text{B.35})$$

Cette valeur va servir à initialiser le champ de densité de surface de prémélange. Le terme de couplage R_{al} qui apparaît dans l'équation de Σ_p est donc,

$$R_{al} = \frac{\Sigma_p}{\Delta t} \quad (\text{B.36})$$

La densité de surface de flamme de prémélange ainsi initialisée garantit la continuité du taux de dégagement d'énergie dans le passage entre les deux modèles ainsi que la continuité du taux de réaction.

Les constantes associés à chaque terme source

Le modèle à trois équations, fait appel à la détermination de sept constantes différentes (tableau B.2).

	α	β	γ
Surface de diffusion (d)	10.0	1.0	1.0
Surface de contact (c)	10.0	1.0	1.0
Surface de prémélange (p)	10.0	1.0	0.0

Tableau B.2 : Constantes du modèle à trois équations: valeurs de référence.

Dillies [78] a imposé des valeurs des constantes α et β égales pour toutes les surfaces. Il n'y a cependant pas de raison apparente pour procéder ainsi. La valeur de α_p est environ cinq fois plus grande que celle utilisée par Boudier et al. [46] (10 par rapport à 2.1). Pour une flamme de prémélange qui se propage en milieu homogène, $\alpha_p = 2.1$ a été le choix mieux adapté aux résultats expérimentaux [46].

Les autres constantes qui apparaissent dans les équations 2.79 à 2.81 sont les nombres de Schmidt σ_i ($i = d, c, p$). Ils n'interviennent pas dans des termes source mais dans les termes de transport diffusif. Leur valeur est égale dans toutes les équations ($\sigma = 0.9$).

B.2.3 Augmentation de l'énergie interne

Le terme source de l'équation de transport de l'énergie interne qui correspond à l'effet de la réaction chimique, est modélisé en fonction du taux de consommation massique de carburant,

$$\bar{Q} = \frac{h_F^0}{M_F} \bar{\omega}_F \quad (\text{B.37})$$

B.3 Calculs effectués

La sensibilité du modèle par rapport aux paramètres mentionnés en début de cette section est ici calculée à partir des résultats suivants:

- Evolution de la quantité globale de surface de contact.
- Evolution des quantités globales de surface de flamme de diffusion et de surface de flamme de prémélange.
- Evolution des taux de réaction correspondants aux espèces de carburant mélangé et non mélangé.
- Evolution de la quantité et distribution des différentes espèces de carburant et d'oxydant dans la chambre.
- Evolution de quelques grandeurs thermodynamiques comme la température dans la chambre.
- Evolution des grandeurs turbulentes: l'énergie cinétique turbulente, son taux de dissipation et le taux d'étirement.

B.3.1 Étude de l'évolution au cours du temps des paramètres physiques

L'étude de référence consiste à injecter dans la chambre de combustion, du carburant pur pendant $15 \times 10^{-4} s$. Dans les conditions du problème, le rapport entre le volume de carburant injecté et le volume de la chambre est d'environ 0.3%.

Le mélange et la surface de contact

Le mélange entre le carburant injecté et l'oxydant est le premier objet de traitement numérique du code de calcul. L'évolution de ces grandeurs, ainsi que celle de la surface de contact, sont les paramètres étudiés ici.

Sur la figure B.1, il est possible de visualiser la distribution de la densité de la surface de contact à trois instants de calcul. A $t = 5 \times 10^{-4} s$, avant l'auto-allumage, la forme de la surface de contact est bien régulière, définissant l'interface entre le carburant et l'oxydant non prémélangés. Juste après l'auto-allumage, à $t = 10 \times 10^{-4} s$, il y a une déformation de la zone de mélange due à l'expansion des gaz chauds, résultant de la combustion. A la fin du calcul, la valeur maximale atteinte par la densité de surface de contact s'atténue au fur et à mesure, mais la quantité totale ne cesse pas de croître à cause de l'injection continue de carburant. Près de l'injecteur, la densité de surface de contact est toujours très forte à cause d'un niveau d'étirement intense. Grâce à une vitesse d'injection élevée par rapport à la vitesse des gaz dans la chambre de combustion, la séparation entre carburant et oxydant se fait dans une zone très mince, avec de très forts gradients de concentration.

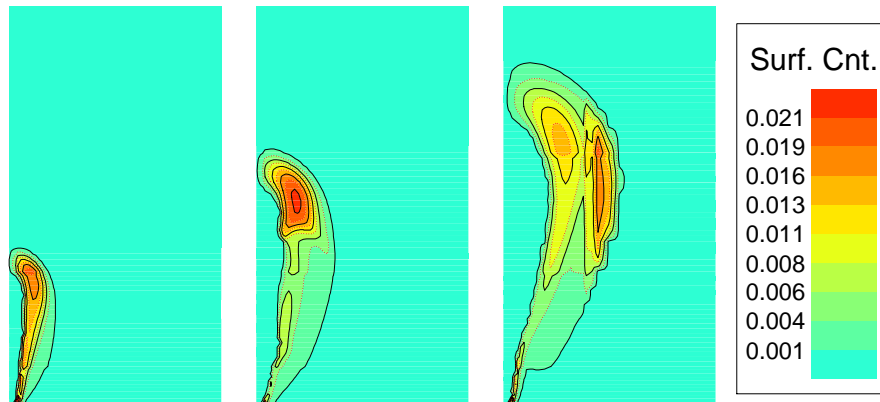


Figure B.1 : Distribution de la surface de contact pour: a) $t = 5 \times 10^{-4} s$; b) $t = 10 \times 10^{-4} s$; c) $t = 15 \times 10^{-4} s$.

L'évolution quantitative de la densité de surface de contact peut être observée sur la figure B.2. Il faut remarquer l'accroissement initial, assez régulier, qui se termine lors de l'auto-allumage. A cet instant, le terme de couplage entre la densité de surface de contact et la densité de surface de flamme de prémélange (dernier terme du côté droit de l'équation 2.80) devient important. En conséquence, la quantité totale de surface de contact diminue. Ensuite, la décroissance de la quantité de surface de flamme de prémélange (figure B.7) et le fait que la surface de flamme de diffusion ne soit pas encore suffisamment importante pour consommer

beaucoup de réactifs, font que la surface de contact augmente de manière significative (instant $t = 1 \text{ ms}$, environ). Une fois que la flamme de diffusion commence à devenir importante, cette pente s'affaiblit.

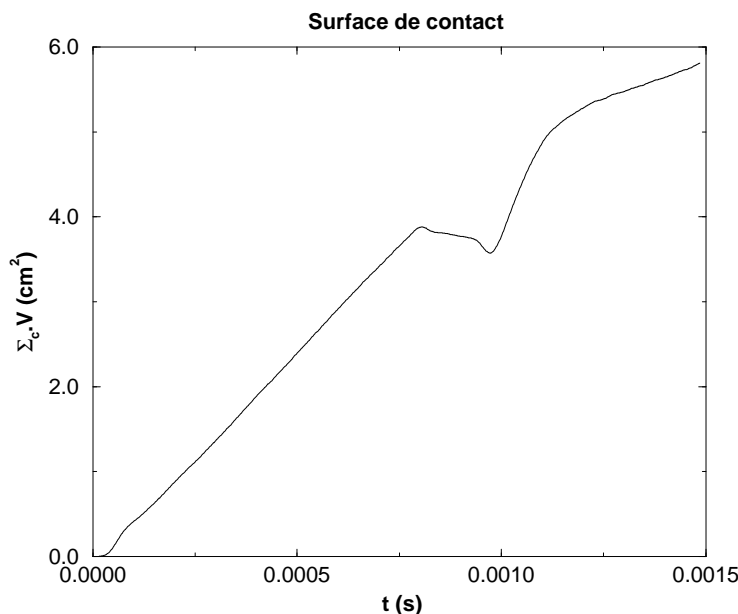


Figure B.2 : Evolution au cours du temps de la quantité globale de surface de contact dans la chambre de combustion.

Le mélange entre le carburant qui entre dans la chambre et l'oxydant qui y est présent est entraîné par la présence de la surface de contact. L'évolution de la concentration de carburant mélangé, à partir de l'instant d'allumage, est présentée sur la figure B.3.

La séquence présentée démarre à $t = 9 \times 10^{-4} \text{ s}$ lors de l'auto-allumage. Le point où l'auto-allumage se produit est facilement identifiable par l'absence locale de carburant. Les réactifs prémélangés sont rapidement consommés, ce qui peut être observé sur les images de la figure B.3, ainsi que sur les courbes de la figure B.4.

Jusqu'à l'instant d'auto-allumage, les quantités de carburant et d'oxydant prémélangés croissent. Le processus d'allumage ne consomme qu'une très faible quantité de réactifs (figure B.8). Ceux-ci disparaissent de manière quasi complète vers l'instant $t = 11 \times 10^{-4} \text{ s}$. L'augmentation qui suit est due à l'augmentation de la surface de contact qui continue à entraîner la formation du mélange.

Les courbes d'évolution du carburant et de l'oxydant prémélangés ont un rapport constant. Ceci s'explique par la méthode de calcul des concentrations. Nous rappelons que le rapport entre les vitesses de diffusion de l'oxydant et du carburant à travers la surface de contact correspond à la valeur stoechiométrique (*cf.* la section précédente).

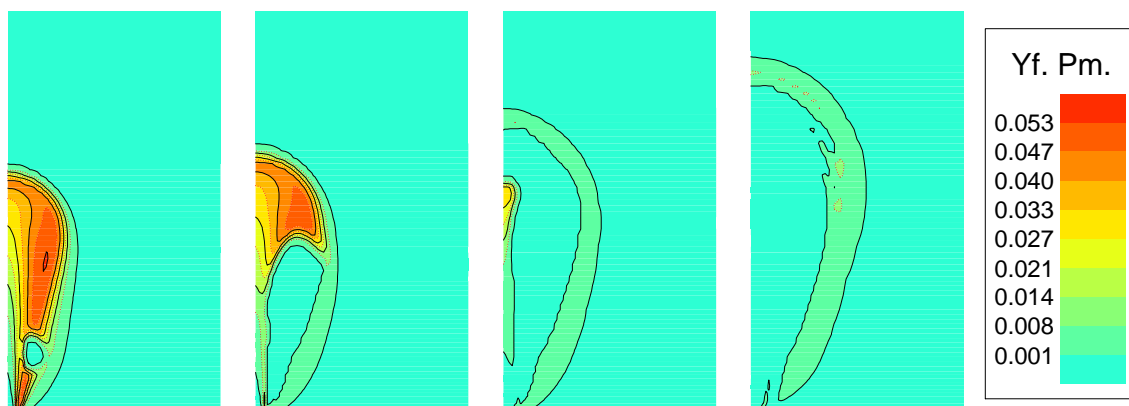


Figure B.3 : Concentration de carburant prémélangé dans la chambre de combustion pour:
 a) $t = 9 \times 10^{-4} \text{ s}$; b) $t = 10 \times 10^{-4} \text{ s}$; c) $t = 11 \times 10^{-4} \text{ s}$; d) $t = 15 \times 10^{-4} \text{ s}$.

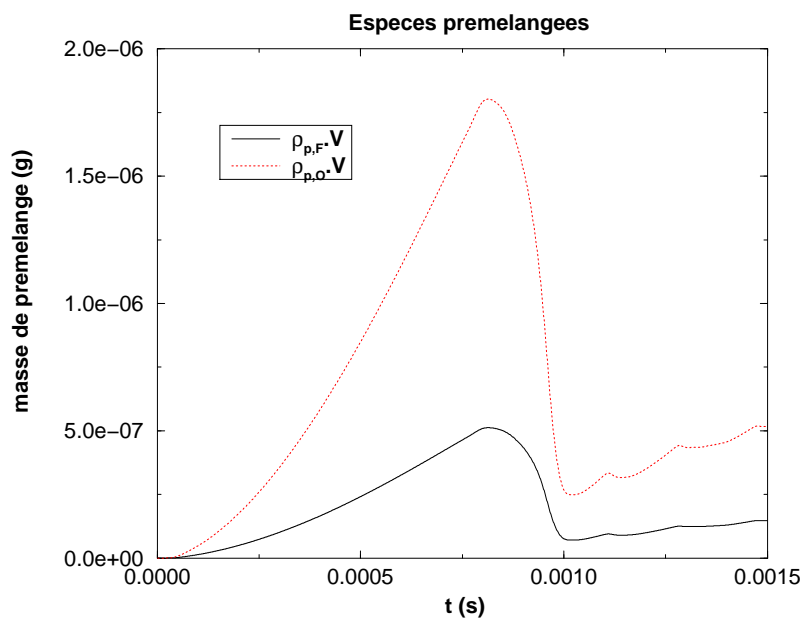


Figure B.4 : Evolution au cours du temps de la quantité globale de carburant et d'oxydant prémélangés dans la chambre de combustion.

Les conséquences de cette approximation sont importantes. D'abord, un mélange stoechiométrique correspond, par rapport aux mélanges à la même température et à des différentes richesses, à la vitesse de flamme laminaire la plus élevée. Enfin, tout le gaz qui est prémélangé va être brûlé. Ceci évite le traitement des gaz prémélangés dont la richesse ne se trouve pas dans les bornes de richesse nécessaires à la propagation d'une flamme de prémélange. Le choix d'un mécanisme de ce type peut être justifié par la faible épaisseur de la zone de gaz prémélangés, ainsi que par la haute vitesse de consommation des réactifs dans cet état.

En ce qui concerne les réactifs non mélangés, leur évolution n'est pas remarquable, car les taux de consommation sont toujours négligeables par rapport aux quantités déjà existantes (figures B.5 et B.12).

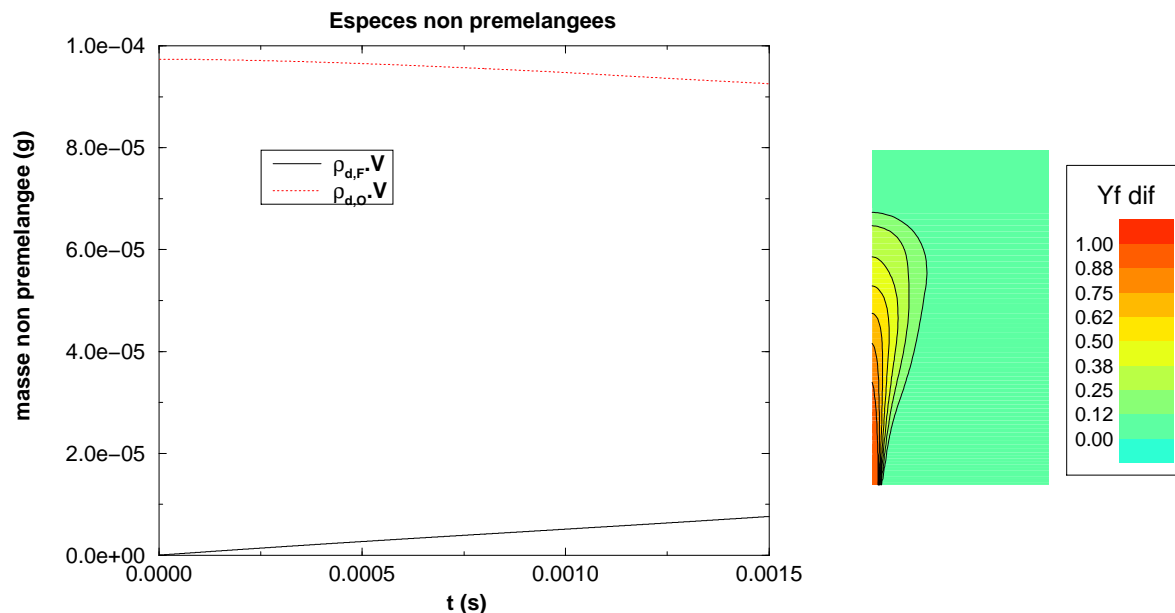


Figure B.5 : Evolution au cours du temps de la quantité globale de carburant et d'oxydant non prémélangés. Distribution de la concentration de carburant non prémélangé dans la chambre de combustion à $t = 15 \times 10^{-4}$ s.

La quantité d'oxydant non mélangé diminue en début de calcul à cause de la formation d'oxydant mélangé. A partir de l'allumage, la flamme de diffusion contribue aussi à la consommation, en augmentant la pente de la courbe. La concentration de carburant de son côté, augmente de manière continue. Sa distribution dans la chambre (aussi représentée sur la figure B.5) est identique durant toute la simulation. L'image présentée est prise à la fin du calcul. La concentration de carburant est maximale au milieu du jet sur l'axe de la chambre de combustion.

La surface de flamme de prémélange et le taux de consommation en prémélange

En comparant la figure B.6 qui montre l'évolution de la densité de surface de flamme de prémélange et la figure B.3, il est clair que la flamme de prémélange existe dans les zones du jet où les réactifs mélangés sont en train de disparaître.

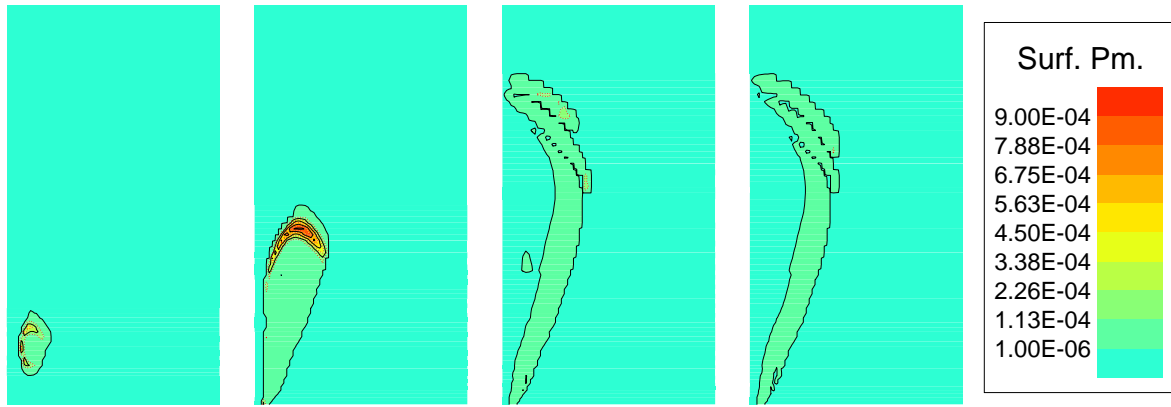


Figure B.6 : Distribution de la surface de flamme de prémélange pour: a) $t = 9 \times 10^{-4} s$; b) $t = 10 \times 10^{-4} s$; c) $t = 14 \times 10^{-4} s$; d) $t = 15 \times 10^{-4} s$.

La figure B.7 décrit l'évolution de la quantité totale de surface de flamme de prémélange au cours du calcul. Comme prévu lors de l'analyse de l'évolution des gaz mélangés, la densité de surface de flamme de prémélange est très forte juste après l'allumage. Les réactifs prémélangés sont rapidement consommés et dès que leurs concentrations deviennent faibles, la quantité de surface de flamme décroît.

Il faut remarquer qu'une fois la majorité des réactifs consommée, le calcul devient instable, avec des oscillations de la quantité de surface de flamme. Ce même phénomène avait déjà été observé sur la figure B.4, où à la fin du calcul, l'évolution des espèces prémélangées souffrait aussi de ce genre d'instabilité. Ce phénomène pourrait être dû au fait que la quantité de surface de flamme de diffusion est faible à cet endroit (figure B.10). Dans ce cas, la non consommation des réactifs non prémélangés fournit des conditions favorables à la croissance de la surface de contact. Une forte densité de surface de contact implique plus de mélange et donc plus de flamme de prémélange. Comme une flamme de prémélange consomme très rapidement les réactifs, elle décroît rapidement. Un nouveau mélange peut alors être formé. Physiquement, il serait normal qu'une flamme de diffusion s'établisse à cet endroit. Cependant, l'observation de la figure B.10 montre que ce n'est pas le cas. La flamme de diffusion en haut du jet présente à l'instant $t = 12 \times 10^{-4} s$ s'affaiblit vers $t = 15 \times 10^{-4} s$. Il y a donc à cet endroit, des conditions pour que le carburant et l'oxydant se mélangent.

La masse de carburant consommée par la flamme de prémélange au cours du temps est représentée sur la figure B.8. La ressemblance entre cette courbe et la courbe de la figure B.7 est remarquable. En effet, il apparaît que les deux grandeurs sont proportionnelles.

Le rapport $\bar{\omega}_{p_F}/\Sigma_p$ est donné par le produit entre la densité du carburant prémélangé et la vitesse de flamme laminaire $\rho_{p_F} S_l$. Comme cette densité est à peu près constante (la pression et la température des gaz prémélangés ne varient pas beaucoup), il suffit que S_l soit, elle aussi, presque constante, pour que la proportionnalité mentionnée existe. En effet, la figure B.9 montre que la vitesse de flamme laminaire dans une maille de calcul ne change pas beaucoup. La maille choisie est celle où l'allumage a lieu en premier $(i, j, k) = (11, 1, 22)$.

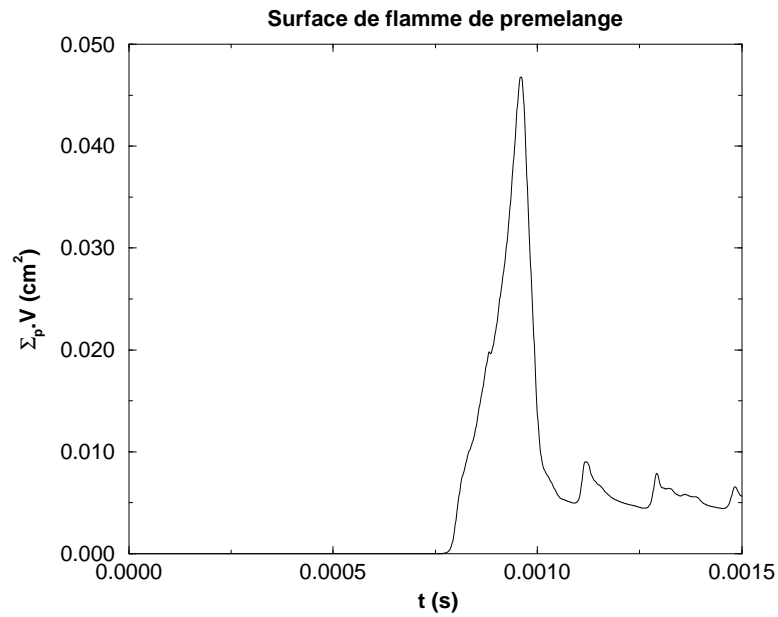


Figure B.7 : Evolution au cours du temps de la quantité globale de surface de flamme de prémélange.

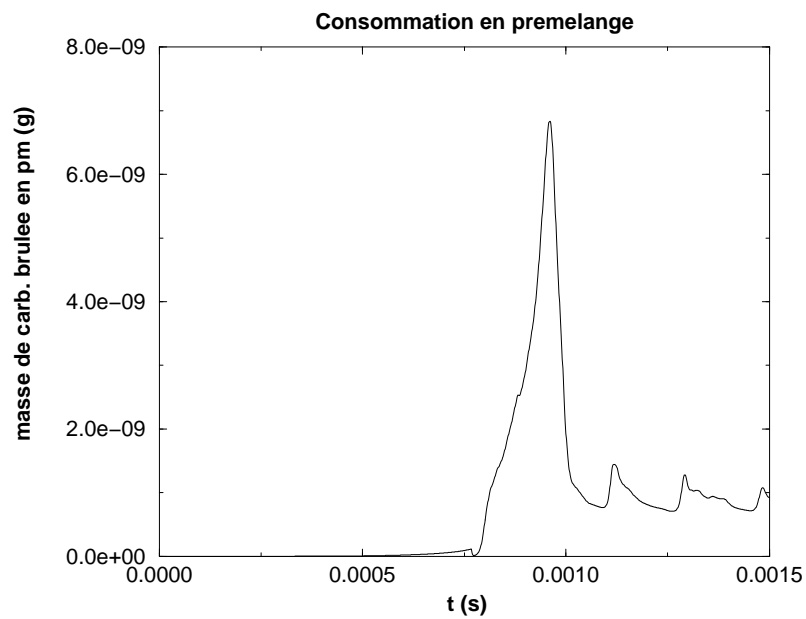


Figure B.8 : Consommation de carburant prémélangé.

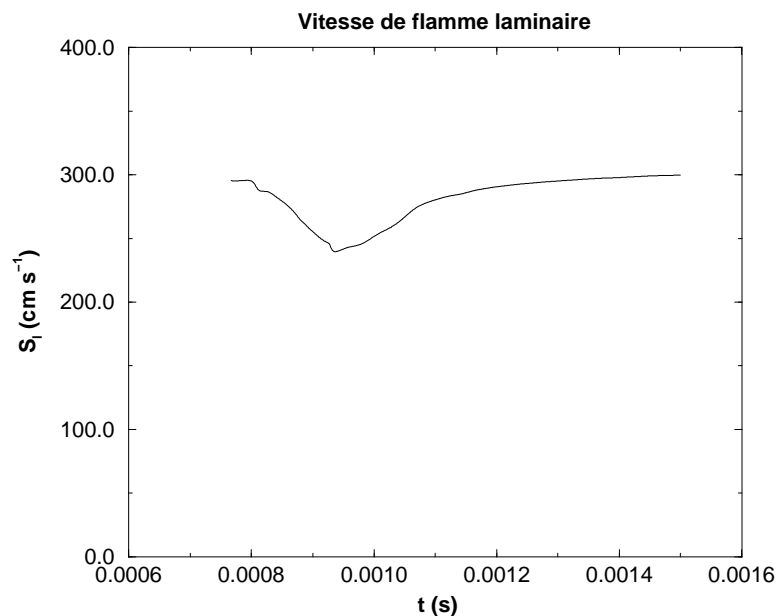


Figure B.9 : Vitesse de flamme laminaire dans une maille de calcul.

Les valeurs calculées de vitesse de flamme laminaire sont légèrement au dessus des valeurs typiques rencontrées pour des flammes hydrocarbure-air (de l'ordre de 100 à 200 cm/s). Il faut cependant remarquer que malgré le fait que la pression soit assez élevée, la température est aussi très élevée. Les vitesses trouvées, ne sont donc pas surprenantes dans les conditions du calcul effectué.

La surface de flamme de diffusion et le taux de consommation en diffusion

La flamme de diffusion est allumée au même endroit que la flamme de prémélange. Elle se propage rapidement vers des zones plus hautes du jet où elle se stabilise (figure B.10). Il semble qu'à cet instant, la vitesse à laquelle le carburant et l'oxydant sont fournis à la flamme est équilibrée par leur vitesse de consommation chimique.

La flamme de diffusion grandit beaucoup plus lentement que la flamme de prémélange car celle-ci part déjà d'une situation où le carburant et l'oxydant se trouvent dans les conditions idéales pour le développement de la combustion. Sur la figure B.11, cette lente croissance initiale peut être constatée. Le développement très rapide de la flamme de prémélange implique qu'au bout d'un certain temps, la flamme de diffusion a aussi une augmentation plus importante. A la fin du calcul, elle semble tendre vers une situation stationnaire. Cependant cette situation ne peut pas être confirmée sans le prolongement du calcul.

La comparaison des figures B.7 et B.11 montre que la valeur de la surface totale de flamme de diffusion est supérieure de trois ordres de grandeur à la valeur de la surface de flamme de prémélange. L'explication peut être déduite des observations suivantes: D'une part, il y a la façon dont la flamme de prémélange se propage comparée à celle dont la flamme de diffusion s'établit. La flamme de prémélange, représentée sur la figure B.6, est née à partir du point d'allumage et s'est rapidement propagée aux zones de gaz prémélangé. La consommation rapide

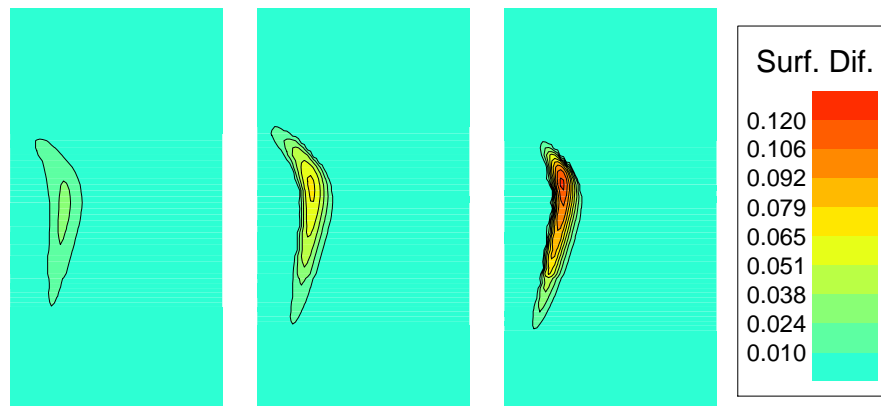


Figure B.10 : Distribution de la surface de flamme de diffusion pour: a) $t = 12 \times 10^{-4} s$; b) $t = 13 \times 10^{-4} s$; c) $t = 15 \times 10^{-4} s$.

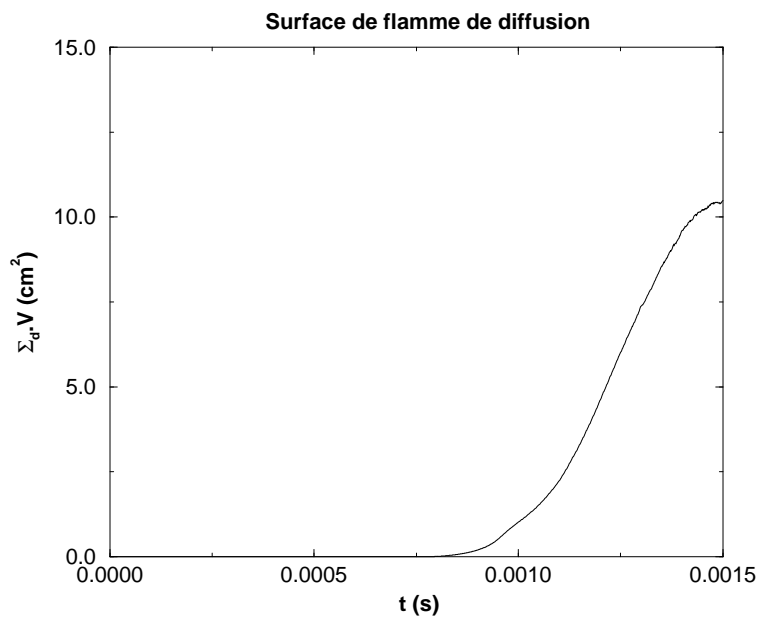


Figure B.11 : Evolution au cours du temps de la quantité globale de surface de flamme de diffusion.

des réactifs ne permet pas que la flamme augmente beaucoup. Par contre, la flamme de diffusion est établie sur l'interface entre le carburant et l'oxydant. Grâce à une vitesse plus réduite de consommation des réactifs, elle a le temps de croître.

La masse de carburant non mélangé consommée au cours du temps est représentée sur la figure B.12. Cette consommation est d'un ordre de grandeur inférieur à celle qui est obtenue en prémélange, malgré le fait que la quantité de surface de flamme de prémélange soit bien inférieure à celle de diffusion. Ainsi, la vitesse de consommation des réactifs joue un rôle important dans chacun des cas. En effet, la vitesse de flamme laminaire en prémélange est à peu près de trois ordres de grandeur supérieur à la vitesse de consommation des réactifs en diffusion.

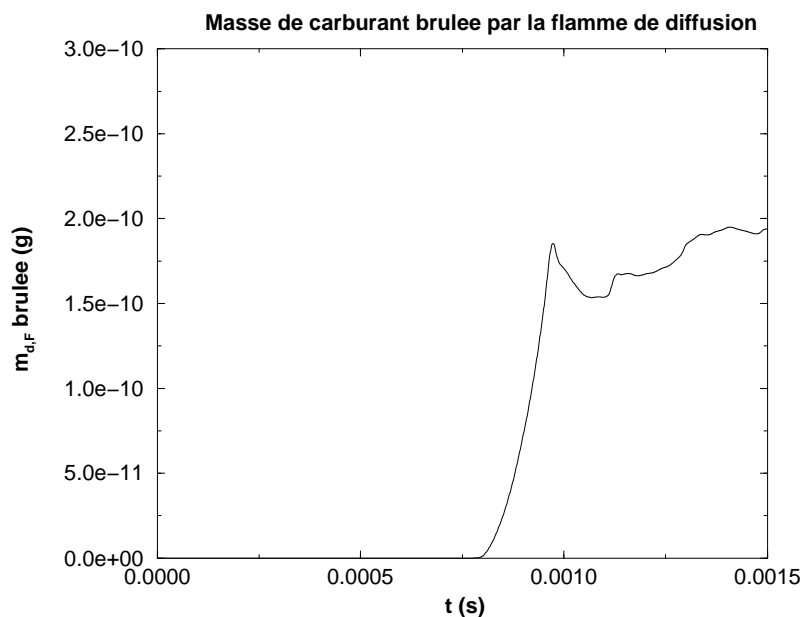


Figure B.12 : Consommation de carburant non prémélangé.

Taux de dégagement d'énergie et évolution de la température

Le dégagement d'énergie et la température sont deux importants paramètres de contrôle d'un modèle de combustion. Des expressions pour la température adiabatique de flamme existent dans la littérature [18] et les valeurs ainsi obtenues peuvent être comparées avec les valeurs calculées par le modèle. Le dégagement d'énergie peut à son tour être calculé à partir de mesures expérimentales.

La température monte lentement dans la chambre de combustion jusqu'à l'auto-allumage. Dans certains points de l'écoulement, où les concentrations de réactifs sont plus favorables au déroulement du schéma d'auto-allumage, la température monte plus vite. Ces points s'allument alors, donnant naissance aux flammes de prémélange. Ce phénomène peut être observé sur la figure B.13.

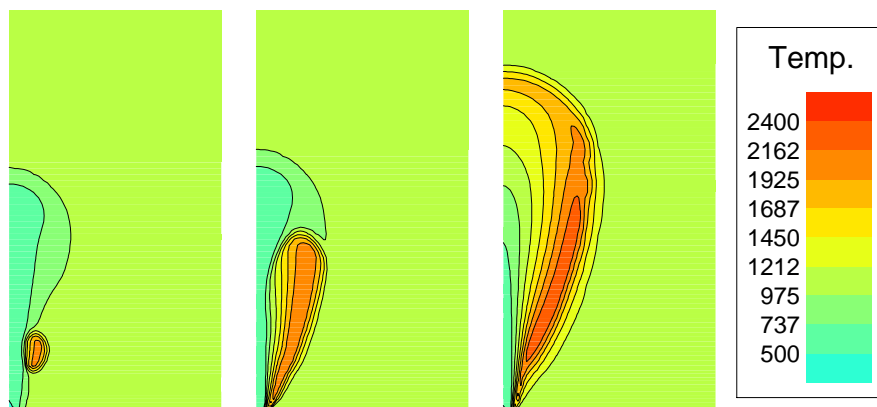


Figure B.13 : Champ de température dans la chambre de combustion pour: a) $t = 9 \times 10^{-4} s$; b) $t = 10 \times 10^{-4} s$; c) $t = 15 \times 10^{-4} s$.

Après l'allumage, la température monte très rapidement lors du passage de la flamme de prémélange. A la fin du calcul, elle se stabilise dans la zone où se trouve la flamme de diffusion. Elle atteint des valeurs maximales autour de $2650 K$. La température adiabatique de flamme de diffusion, calculée à l'aide de la formule A.36 (flamme de Burke-Schumman) dans les conditions du problème, est de $2832 K$, valeur qui ne s'éloigne pas beaucoup de celle trouvée par le modèle.

La forme de la courbe de dégagement d'énergie basée sur la consommation de carburant (figure B.14) est la même que celle de la courbe de consommation de carburant prémélangé (figure B.8). Finalement, il s'agit d'un résultat attendu, car la masse consommée de carburant prémélangé est, comme il a été vu auparavant, supérieure d'un ordre de grandeur à la masse consommée de carburant non prémélangé. Son influence est donc plus accentuée sur le dégagement d'énergie.

B.3.2 Sensibilité du modèle aux variations de maillage

Le maillage a une importance fondamentale dans le calcul numérique. Tout modèle censé simuler numériquement un processus physique doit converger vers un résultat qui ne change plus quand la taille moyenne des mailles est en dessous d'une certaine limite. Des tests de sensibilité du modèle par rapport à la taille des mailles ont donc été effectués. Dans un premier temps, le nombre de mailles a été divisé par deux par rapport au calcul de référence ($maillage \times 0.5$). Ensuite, le nombre de mailles a été multiplié par deux ($maillage \times 2$). L'évolution de la quantité totale de chacune des surfaces dans les trois calculs est présentée dans la figure B.15.

Les résultats obtenus montrent que pour la taille de mailles utilisée, le modèle ne semble pas très sensible aux variations du nombre et de la taille de ces mailles. Les différences obtenues entre les différents calculs sont assez faibles. La figure B.15 ne montre que l'évolution de la quantité des différentes surfaces. Cependant, d'autres paramètres, comme le dégagement d'énergie et la quantité de réactifs mélangés, ont aussi été observés. La tendance a été toujours pour une faible dépendance par rapport aux variations du maillage. Par exemple, les variations du délai d'auto-inflammation tournent autour de 4% par rapport au cas de référence.

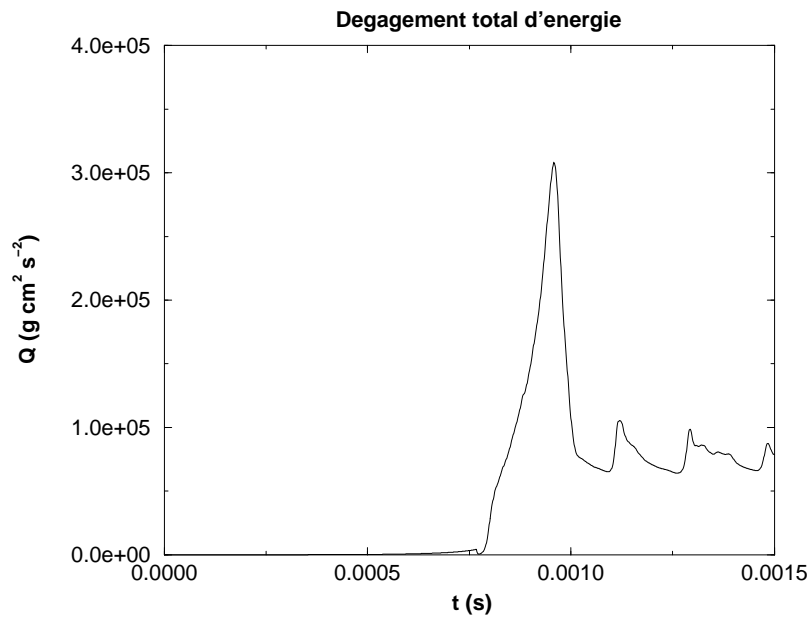


Figure B.14 : Dégagement d'énergie dans la chambre de combustion, basé sur la consommation totale de carburant.

La comparaison entre les trois courbes de la figure B.15 montre que la grandeur qui subit la plus forte variation est la quantité de surface de flamme de prémélange. En effet, la quantité de gaz prémélangés dépend de la concentration de gaz non prémélangés. Quand le maillage est moins dense, la diffusion numérique est facilitée et donc, les gaz non prémélangés arrivent plus facilement à chaque maille. La quantité de surface de contact augmente, ainsi que la concentration de gaz prémélangés. Une autre conséquence de la plus grande diffusivité numérique est l'augmentation du délai d'allumage. Dans ce cas, c'est la chaleur qui diffuse plus facilement et donc, la température d'auto-inflammation qui est atteinte plus tard.

B.3.3 Sensibilité du modèle aux changements de la production des différentes surfaces

Les équations de transport des différentes densités de surface (équations 2.79 à 2.81) font intervenir un grand nombre de constantes qui agissent sur leurs termes sources. Une étude de la sensibilité du modèle à la variation de ses constantes s'avère donc nécessaire. Des calculs peuvent être effectués concernant les termes de production, de destruction ou de couplage de chaque équation.

Termes de production

Les constantes agissant sur ces termes sont les α_i ($i = d, c, p$). Nous avons pour chaque surface réduit leurs valeurs à la moitié. Les résultats obtenus sont représentés sur la figure B.16.

Dans tous les cas, les évolutions des différentes surfaces semblent très sensibles aux changements de la constante α :

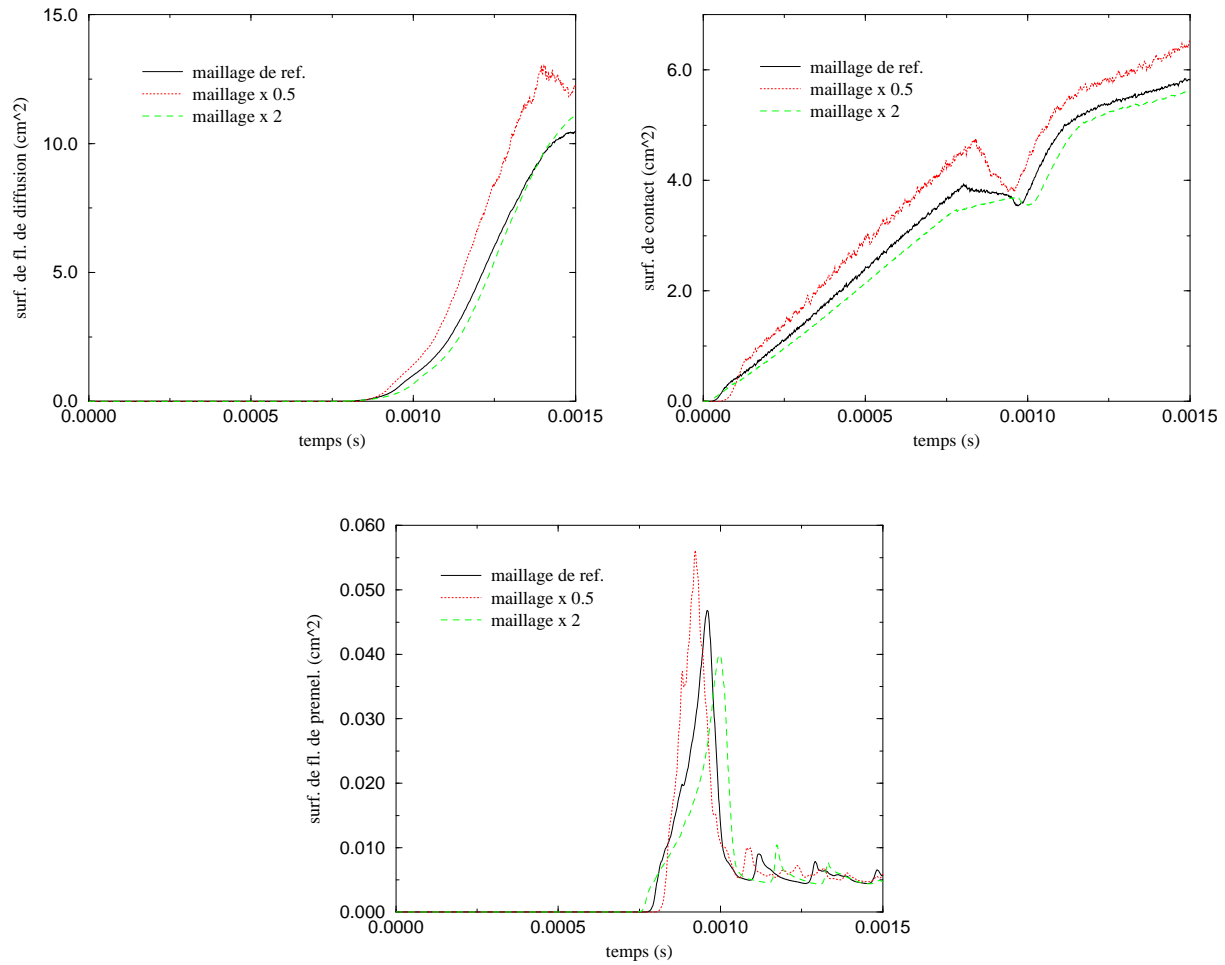


Figure B.15 : Evolution des quantités totales de surface de flamme de diffusion, de contact et de flamme de prémélange en fonction du maillage.

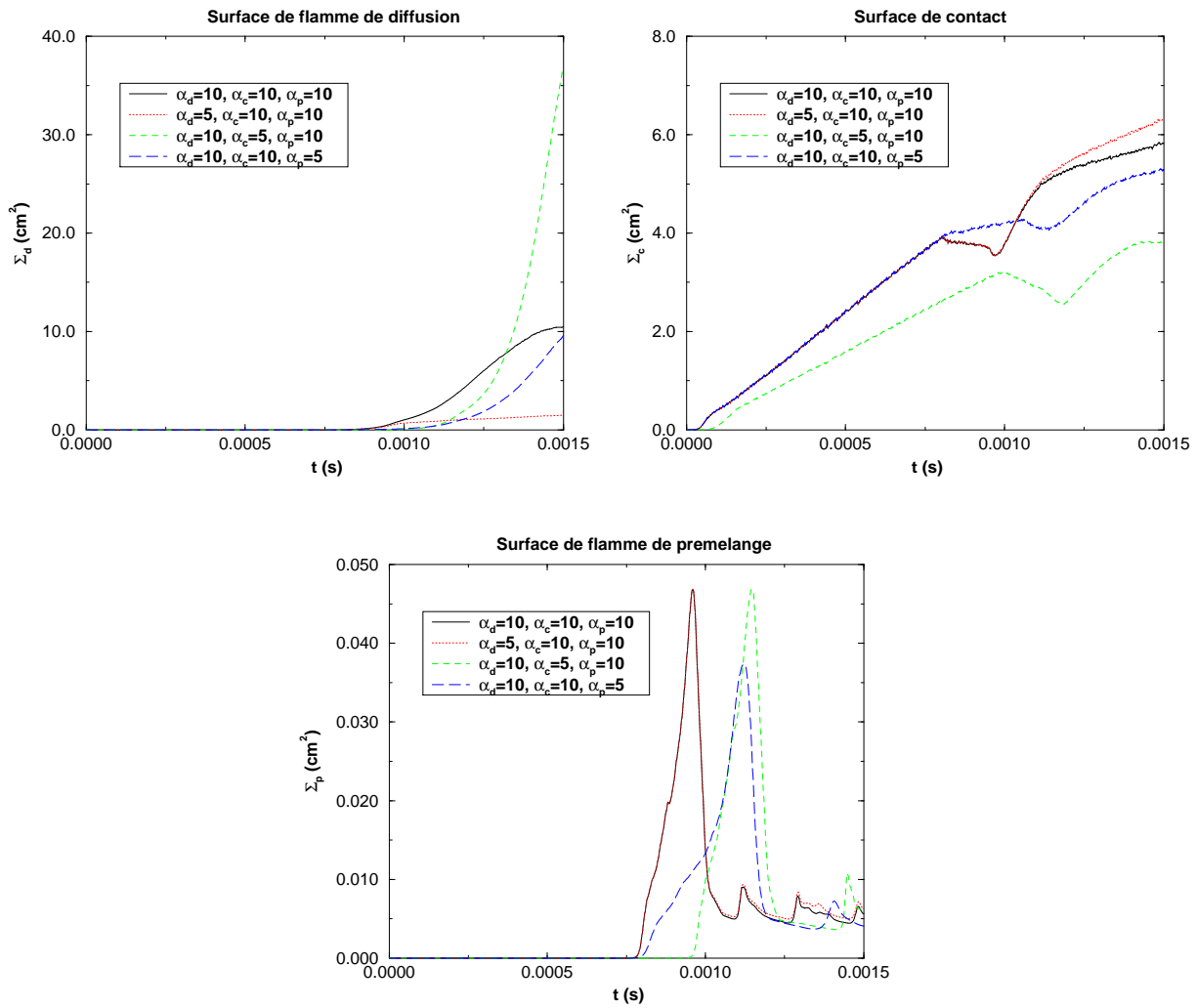


Figure B.16 : Evolution des quantités totales de surface de flamme de diffusion, de contact et de flamme de prémélange en fonction de la constante α_i liée au terme de production des différentes surfaces.

- Pour la surface de flamme de diffusion, le changement le plus fort a lieu lors de la modification de la production de surface de contact. En effet, en la diminuant, les quantités de carburant et d'oxydant non mélangés disponibles à être brûlés augmentent. En conséquence, la flamme de diffusion devient plus importante.
- La réduction de la production de surface de contact implique l'augmentation du délai d'auto-allumage grâce à la diminution de la quantité de gaz prémélangés.
- Quand les productions de surface de flamme de diffusion et de surface de contact ont diminué, cela a eu très peu d'influence sur la flamme de prémélange. Comme il a déjà été signalé, la contribution principale pour le dégagement d'énergie provient de la flamme de prémélange. La diminution de la production de surface de flamme de prémélange doit donc entraîner une réduction de la quantité de chaleur libérée pendant la réaction.

Des calculs avec $\alpha = 2.1$ ¹ ont été également effectués. Les tendances observées ont été les mêmes qu'avant. Nous avons pu remarquer que la principale modification s'est produite lors du changement du terme de production de la surface de contact. Dans les 1.5 ms qu'a duré le calcul, nous n'avons pas pu allumer le mélange, car la quantité de réactifs prémélangés n'était pas suffisante.

Il est donc possible de conclure que le choix des constantes liées aux termes de production de surface a une grande importance sur les résultats obtenus. L'applicabilité du modèle 3CFM implique que des recherches doivent encore être menées de façon à déterminer les valeurs les plus représentatives de la réalité physique.

Termes de destruction

Les constantes agissant sur ces termes sont les β_i ($i = d, c, p$). Nous avons pour chaque surface multiplié par 2 leurs valeurs. Les résultats obtenus sont représentés sur la figure B.17.

Nous pouvons remarquer que les tendances obtenues en doublant la destruction de chaque surface sont pratiquement les mêmes que celles obtenues en réduisant leur production de moitié. Il ne s'agit pas seulement de la forme des courbes mais aussi de leurs valeurs. La seule exception est la surface de flamme de prémélange. Ce résultat est important dans la mesure où, pour les surfaces de contact et de flamme de diffusion, il existe une relation entre leur production et leur destruction.

B.3.4 Sensibilité du modèle à l'initialisation des grandeurs turbulentes

Les hypothèses posées lors de l'application du modèle de flamme cohérente impliquent que la turbulence est le principal paramètre de contrôle de la combustion. La cinétique chimique est traitée comme un phénomène très rapide par rapport au mélange turbulent. En ce qui concerne l'effet de la température, il ne se fait sentir directement que lors de l'application du modèle aux flammes de prémélange. En effet, la température des gaz frais est utilisée pour le calcul de la vitesse de flamme laminaire. Pour une flamme de diffusion, seuls les changements de la densité dus à la température traduisent cette influence.

¹valeur utilisée par Boudier *et al.* [46] dans le cadre de l'application du modèle de flamme cohérente à la combustion dans les moteurs essence

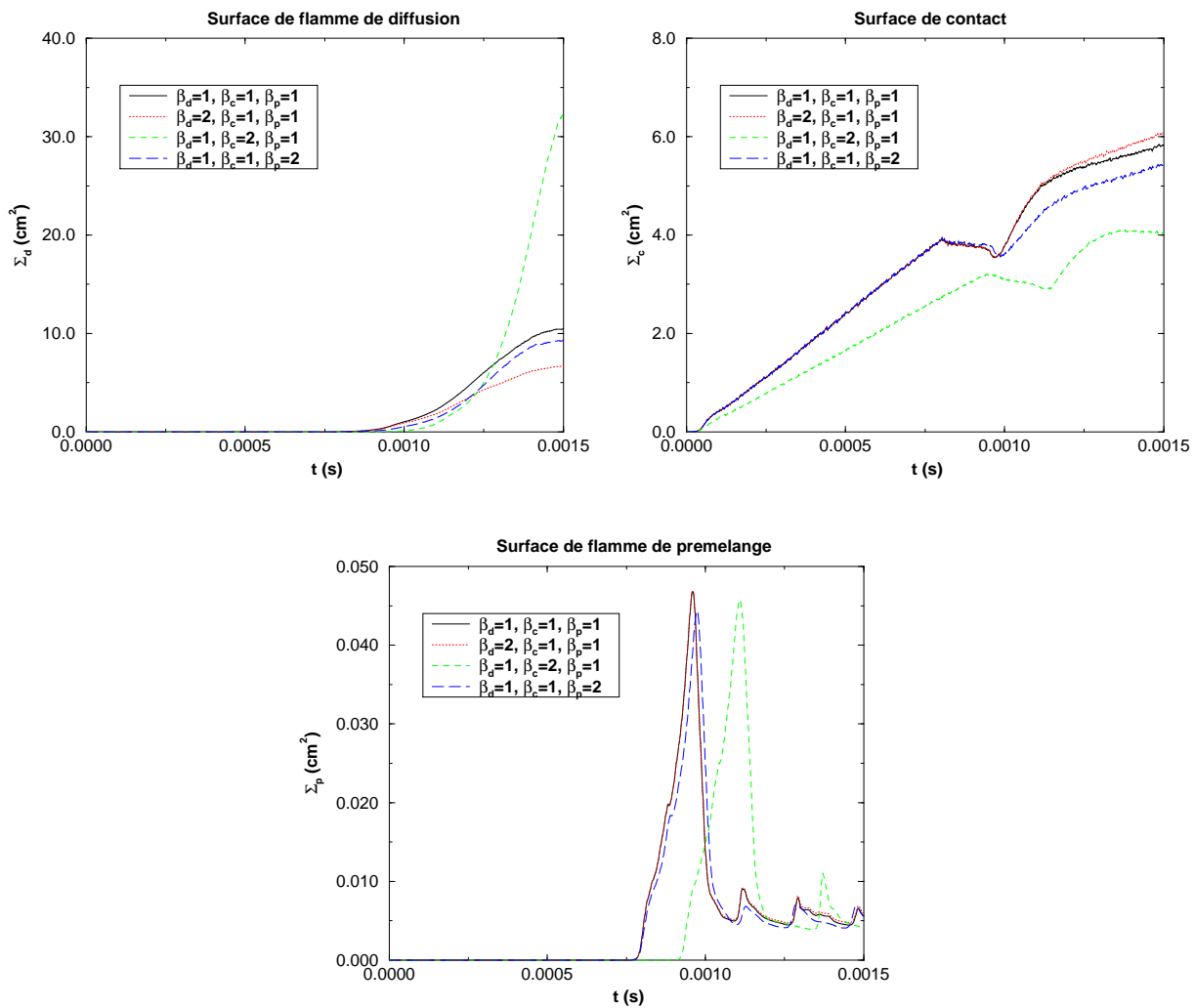


Figure B.17 : Evolution des quantités totales de surface de flamme de diffusion, de contact et de flamme de prémélange en fonction de la constante β_i liée au terme de destruction des différentes surfaces.

Il semble donc important d'étudier la sensibilité du modèle par rapport aux grandeurs turbulentes, l'énergie cinétique turbulente k , son taux de dissipation ϵ et le rapport entre eux (ϵ/k représente l'étirement turbulent associé aux grandes échelles). Ainsi, les valeurs initiales de l'énergie cinétique turbulente et de la longueur intégrale ont été changées. Les valeurs modifiées sont typiques d'un moteur 4 soupapes à allumage commandé. Le tableau B.3 représente les valeurs de référence ainsi que les nouvelles valeurs des variables utilisées. Les calculs effectués se rapportent pour l'instant à la période d'auto-allumage, où la turbulence joue un rôle fondamental dans la création du mélange.

	calcul de référence	calcul modifié
k (cm^2s^{-2})	3.00×10^5	2.40×10^5
l_t (cm)	0.06	0.40
ϵ (cm^2s^{-3})	1.15×10^9	1.24×10^8
Λ (s^{-1})	3.83×10^3	5.15×10^2

Tableau B.3 : Paramètres turbulents de référence.

L'intensité turbulente dans le cas de référence est la plus forte. La valeur des fluctuations turbulentes, ainsi que celle de l'étirement, est plus élevée. Le terme source de l'équation de transport de surface de contact étant proportionnel à l'étirement, il semble logique que la quantité de surface de contact et donc de réactifs prémélangés soit supérieure dans le calcul de référence. Or la figure B.18 montre exactement le contraire.

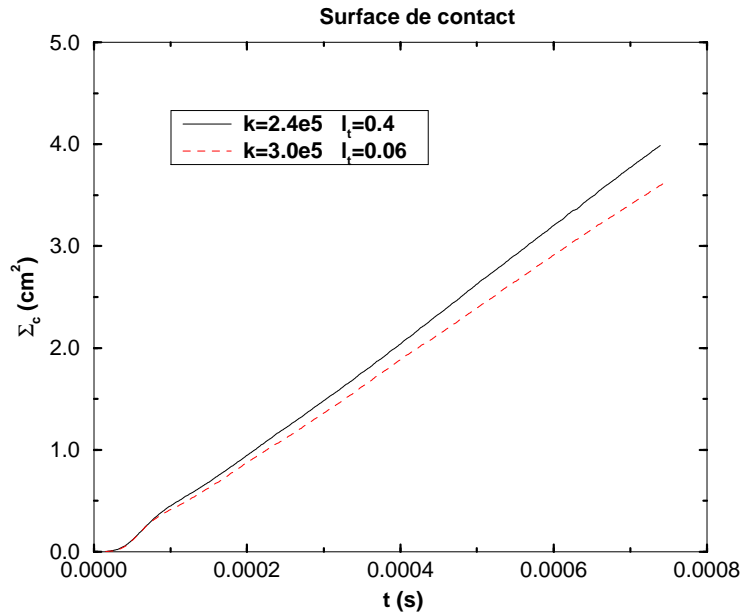


Figure B.18 : Comparaison de l'évolution de la quantité de surface de contact en faisant varier la turbulence initiale.

En effet, un étirement initial plus fort semble ne pas correspondre à une plus grande quantité de surface de contact et donc, de mélange. Ceci est confirmé par un allumage plus tardif. Sur la figure B.19 l'évolution des différentes grandeurs turbulentes moyennées sur l'ensemble du volume de calcul est représentée. Elles sont évaluées pendant le mélange, avant l'auto-allumage.

- ϵ décroît et est plus grande dans le calcul de référence. Sa valeur initiale est aussi plus élevée dans ce cas.
- k décroît et si au début du calcul, les valeurs de l'énergie cinétique turbulente sont supérieures dans le cas de référence, elles deviennent inférieures au bout d'un certain temps. Ceci est dû au plus grand taux de dissipation dans le cas de référence. Cependant, la différence entre l'énergie cinétique turbulente entre le début et la fin du calcul est assez faible, ce qui conditionne le calcul de l'étirement.
- L'étirement décroît aussi, car il est contrôlé par la variation du taux de dissipation. Il est donc toujours supérieur dans le cas de référence.

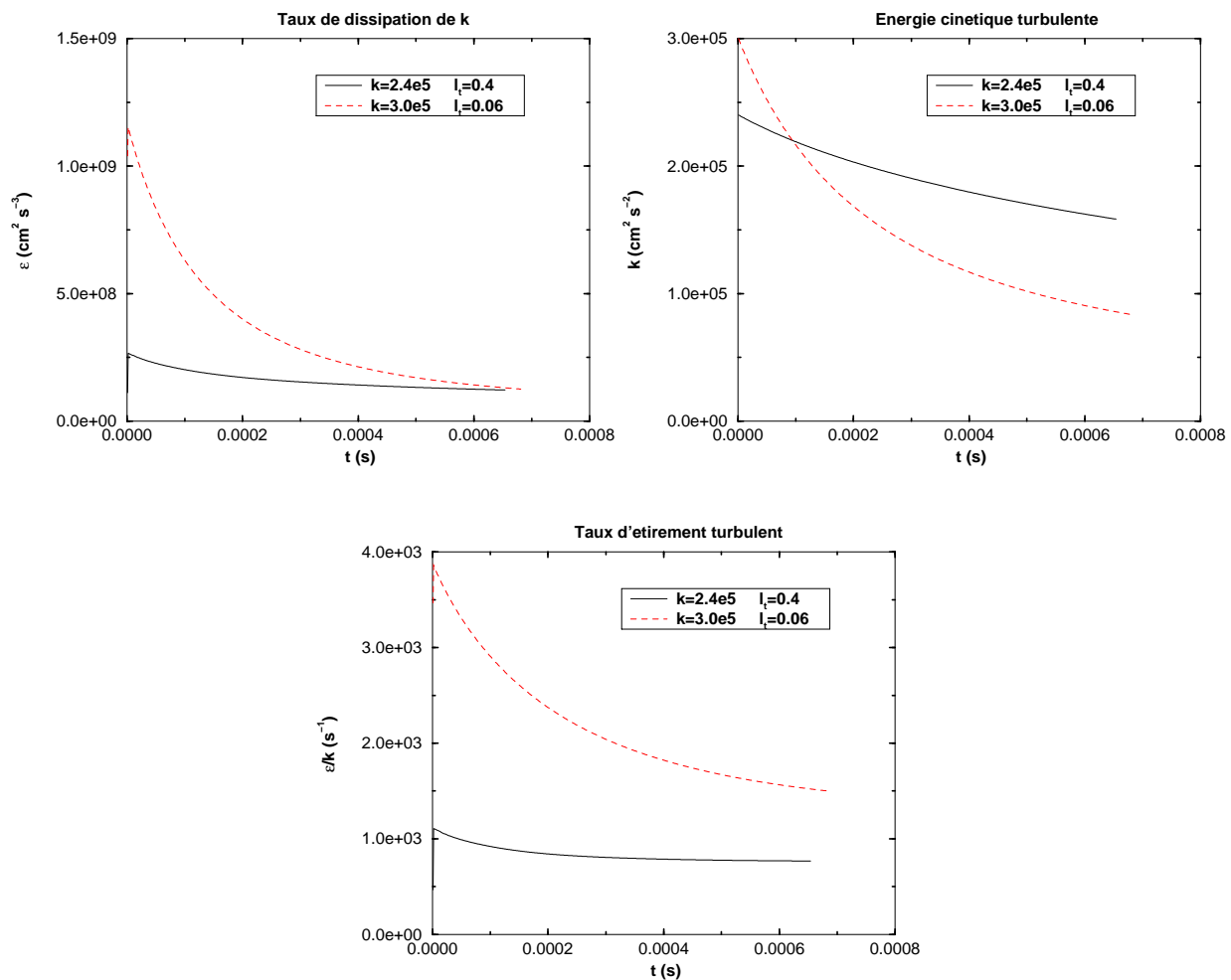


Figure B.19 : Evolution du taux moyen volumique de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, de l'énergie cinétique turbulente moyenne, et du taux volumique moyen d'étirement.

L'évolution des termes sources de l'équation de transport de la densité de surface de contact (équation 2.81) a aussi été contrôlée. La différence entre les termes de production et de destruction de densité de surface est à peu près constante au cours du calcul. Alors, pourquoi il y a-t-il plus de surface de contact quand l'étirement est inférieur?

- L'augmentation des fluctuations turbulentes u' , conséquence de l'augmentation de k , implique une vitesse de mélange supérieure. Le temps caractéristique de mélange est réduit mais rien n'est dit sur les quantités mélangées.
- La diminution de la longueur intégrale de turbulence implique une zone de mélange de largeur plus faible. En effet, il ne faut pas considérer que l'étirement est la seule grandeur responsable par l'évolution de la surface de contact. Il faut aussi tenir compte des quantités de carburant et d'oxydant non mélangées. Or, la diffusion turbulente varie avec k^2/ϵ , valeur plus petite dans le cas de référence. Il y aura donc dans ce cas moins de carburant mélangé.

Dans les conditions du problème, le deuxième facteur doit s'imposer au premier pour qu'il y ait à la fin du calcul plus de mélange dans le cas modifié.

B.3.5 Sensibilité du modèle à l'initialisation de la surface de contact

Le problème de l'initialisation des grandeurs intervenant dans un calcul numérique n'est pas simple. Une partie importante des modèles numériques de simulation est très sensible aux valeurs initiales. En général, pour éviter les problèmes de diffusion numérique dus par exemple à l'application de pas de temps trop élevés, il faut que les valeurs initiales soient distribuées par un certain nombre de mailles de calcul. Or, une telle condition n'est vérifiée par aucune des densités de surface définies dans le modèle étudié.

Une nouvelle fois, la surface de contact va être la première à être abordée dans cette étude. Il s'agit de la grandeur qui guide tout le déroulement du problème. Sa valeur initiale est distribuée de manière uniforme par une seule rangée de mailles, sur l'interface carburant-air. Numériquement, il s'agit d'une initialisation qui peut mener à une diffusion numérique trop rapide de la surface de contact.

Les calculs sont effectués pendant le processus initial de mélange et d'allumage car ici, seule la surface de contact intervient.

Sensibilité par rapport à la distribution initiale: Gauss et Dirac

Une distribution gaussienne uniforme a été choisie. La densité initiale de surface de contact est distribuée sur six mailles dans le sens de l'écoulement (figure B.20). Cette distribution est uniforme dans le sens perpendiculaire à l'écoulement. Pour être rigoureuse, la valeur près de la paroi devrait être nulle ou très proche de zéro, de manière à suivre l'intensité de la turbulence responsable du mélange. En effet, cette grandeur est nulle sur la paroi et donc, aucun mélange ne se produirait à cet endroit. Cependant, une telle approximation permet déjà de vérifier l'influence du changement imposé.

Les résultats obtenus, présentés sur la figure B.21 permettent de regarder le problème de manière aisée, car aucun changement n'a été observé. Le modèle ne semble donc pas sensible à la forme lorsque la densité de surface de contact est initialisée.

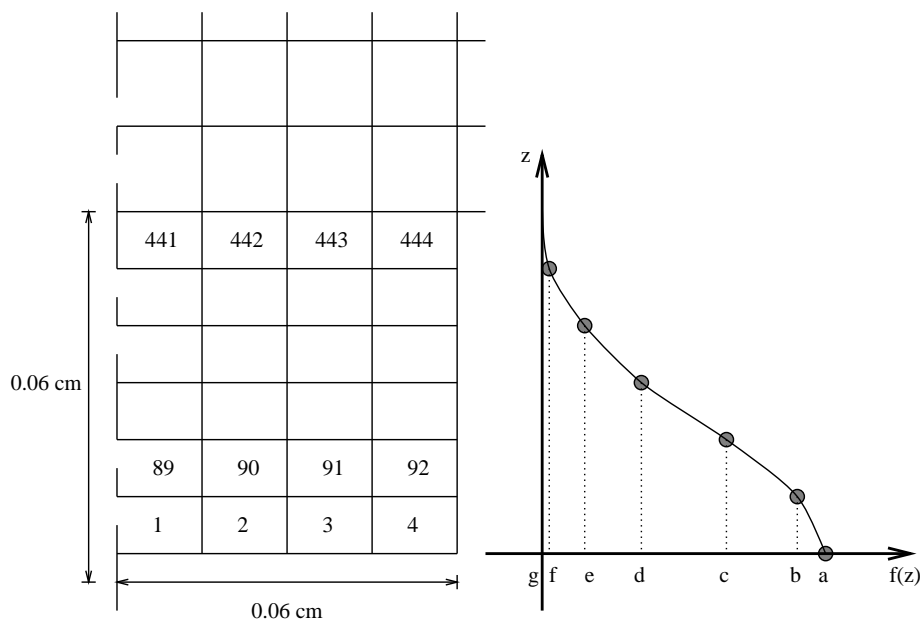


Figure B.20 : Distribution gaussienne de la densité initiale de surface de contact.

Sensibilité par rapport à la quantité initiale de surface de contact

En prenant la distribution gaussienne comme base, la quantité initiale de surface de contact a été modifiée. Elle a d'abord été multipliée par deux et ensuite par dix. Comme pour le cas test antérieur, aucun changement n'a été observé. La production de surface de contact semble suffisamment forte par rapport aux valeurs initiales, pour pouvoir absorber l'effet des altérations introduites.

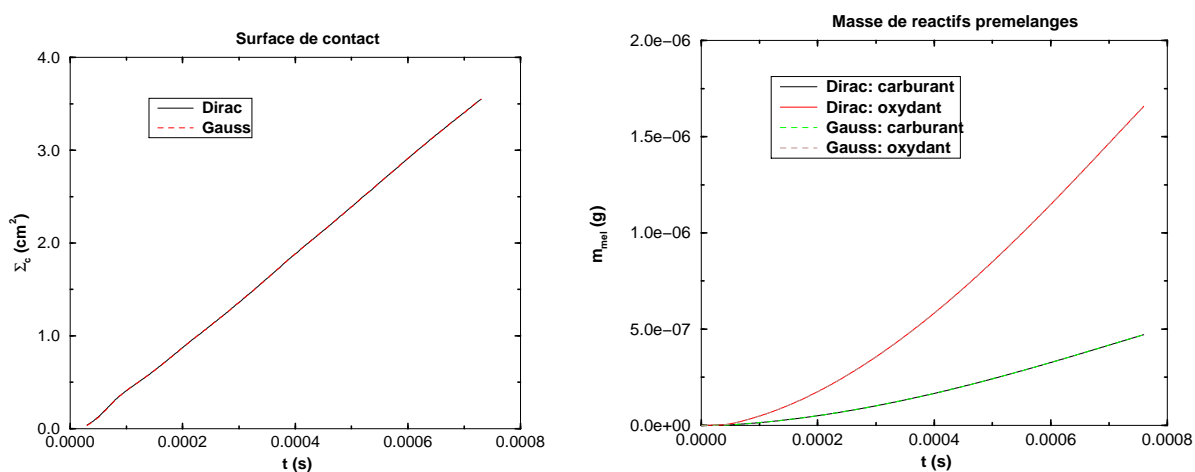


Figure B.21 : Evolution de la surface de contact pendant la phase de mélange et d'auto-allumage. Evolution des masses de carburant et d'oxydant prémélangés.

B.4 Conclusion

L'analyse des résultats des différents calculs effectués a permis l'étude du comportement du modèle 3CFM. Globalement, les calculs montrent que le modèle peut reproduire les tendances vérifiées dans la combustion Diesel. Cependant, des difficultés apparaissent dues à la manière complexe dont la combustion est traitée.

Annexe C

Influence du nombre de Damköhler

Le nombre de Damköhler calculé à partir de l'expression 3.32 est un paramètre très intéressant pour la compréhension du système étudié. Le nombre de Damköhler est représentatif du rapport entre les échelles de temps caractéristiques turbulente et chimique présentes dans le domaine. Sa dépendance du terme $(\partial Z/\partial x)_f^2$ permet de le calculer en fonction de différents types d'écoulements carburant-oxydant, sans perte de généralité.

L'évolution du nombre de Damköhler a donc un rapport direct avec les différents événements qui se déroulent pendant le processus d'allumage et d'établissement d'une flamme de diffusion. Il pourrait éventuellement servir comme paramètre important dans les modèles, surtout comme critère de liaison entre les formulations obtenues pour les différentes phases de l'écoulement.

Sur la figure C.1 sont représentées deux courbes différentes. Les deux se reportent à l'évolution de la combustion au sein d'un écoulement de carburant plus oxydant initialement non mélangés. La première courbe montre l'évolution du terme $(\rho_f t)$, étant ρ_f la densité évaluée à $Z = Z_{st}$ et t , le temps. Ce terme est proportionnel au nombre de Damköhler pour un écoulement non cisailé de deux réactifs non mélangés quand $t = t_0$. La deuxième courbe est celle en S décrite par Liñan, où la température maximale de l'écoulement est tracée en fonction du nombre de Damköhler.

Les problèmes de modélisation de la transition entre l'allumage d'une flamme de diffusion et son état parfaitement établi, viennent du fait que la courbe de $T_{max} \simeq 1/\rho_f$ n'est pas univoque en fonction de Da . Il existe une région, entre Da_c et Da_i où le problème a plusieurs solutions.

Partons par exemple d'un point sur la partie basse de la courbe en S . En augmentant Da , la température monte jusqu'au point $Da = Da_i$. Ceci correspond à l'augmentation initiale sur la première figure. Dans ce cas, comme $\rho_f = C_{te} = \rho_u$ (u de *unburned*), Da monte de façon monotone en fonction du temps. En arrivant à $Da = Da_i$ (allumage), Da diminue parce que ρ_f diminue (échauffement des gaz). Selon Liñan, cette partie de la courbe entre Da_i et Da_c est instable et très rapidement, le point $Da = Da_c$ est atteint. En arrivant à Da_c , ρ_f devient à nouveau constant puisque la flamme de diffusion s'établit et que la température se stabilise. Alors $\rho_f = C_{te} = \rho_b$ (b de *burned*) et Da monte à nouveau de façon monotone en fonction du temps.

Reprenons le même raisonnement, mais en sens inverse. Nous partons maintenant d'un point sur la partie haute de la courbe en S en faisant diminuer Da . Arrivée au point $Da = Da_c$, la

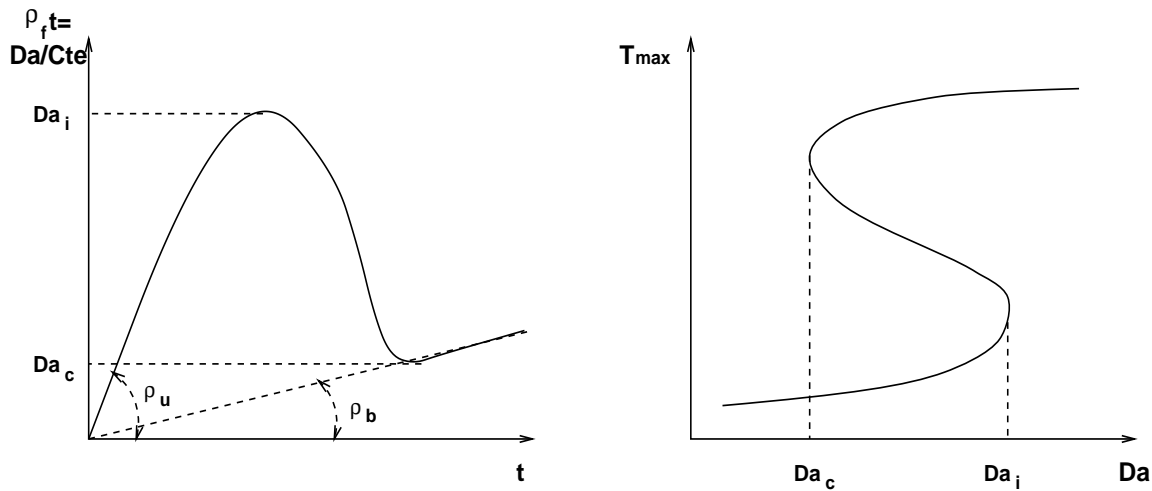


Figure C.1 : Evolution du nombre de Damköhler en fonction du temps de calcul. Evolution de la température maximale en fonction du nombre de Damköhler. Da_c = Damköhler critique, Da_i = Damköhler allumage.

flamme ne peut plus exister et s'éteint. La courbe en S ne peut donc être suivie en sens inverse. La température descend vers la partie basse de la courbe en suivant la tangente verticale au point $Da = Da_c$.

Ce mécanisme non inversible de la température maximale en fonction de l'écoulement, ainsi que l'instabilité de l'allumage montrent combien il est difficile d'étudier les phases de transition dans une flamme de diffusion. L'instabilité de ces mécanismes les rend très sensibles. Des petits écarts lors de la modélisation peuvent facilement conduire à une description médiocre du système.

Aussi, l'utilisation du nombre de Damköhler comme paramètre du problème n'est pas non plus évidente en raison de son comportement non univoque. Même si la figure C.2 montre que le Damköhler critique de validité du modèle de *pdf* est presque indépendant de l'intensité turbulente, cette valeur de Da est aussi caractéristique d'autres phases de l'écoulement.

L'analyse fondée sur le nombre de Damköhler est sans doute intéressante pour la compréhension des mécanismes d'allumage et d'établissement des flammes de diffusion, mais malheureusement, elle n'apporte pas beaucoup de résultats pratiques au modélisateur.

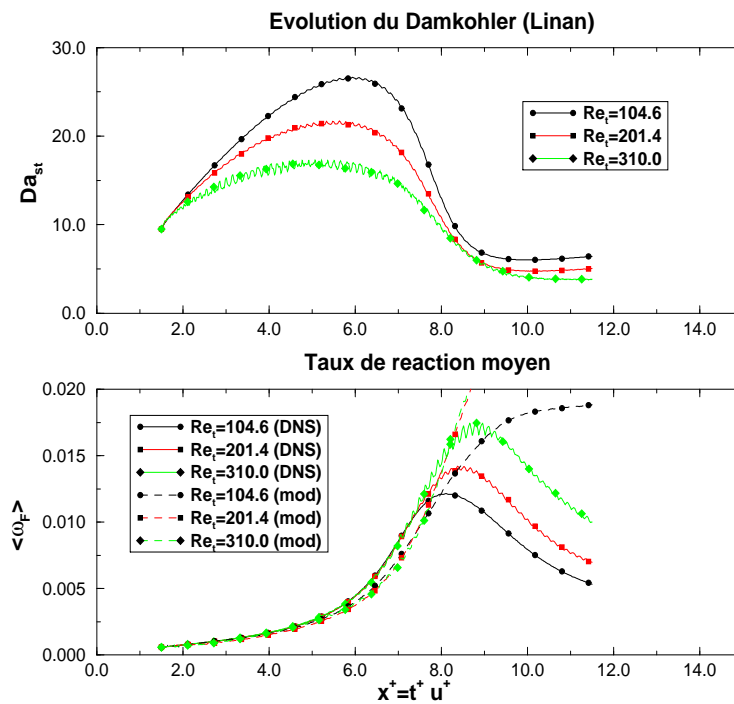


Figure C.2 : Evolution du nombre de Damköhler caractéristique de la flamme pendant l'auto-allumage et l'établissement de la flamme de diffusion pour des intensités de turbulence différentes. Comparaison entre l'évolution du taux de réaction mesuré en DNS et du taux de réaction modélisé.

Annexe D

Méthode d'intégration numérique

Deux tests différents ont été effectués pour contrôler la fiabilité de la méthode d'intégration numérique utilisée dans le calcul des taux de réaction moyens. D'abord un test de précision et ensuite un test de convergence.

D.1 Test de précision

L'intégrale $\int_0^1 P(Z) dZ$ a été calculée sur tous les points du domaine où la variance de Z permet la détermination des fonctions β (test sur la variance $\widetilde{Z}''^2 > 5.0 \times 10^{-4}$). Il a été vérifié que les résultats sont compris entre 0.99 et 1 sur tout le domaine de calcul.

D.2 Test de convergence

Le domaine de la fonction $\beta(Z)$ est compris entre $Z = 0$ et $Z = 1$. Quand les paramètres a ou b de la fonction sont inférieurs à 1, $\beta(Z)$ n'est pas définie sur ces deux points. Ils doivent donc être éliminés du domaine d'intégration. Le choix des points limites où la méthode n'est plus en mesure d'être employée ne peut pas être hasardeux. La valeur de l'intégrale calculée ne doit pas dépendre de ce choix, sachant aussi que plus les limites d'intégration s'approchent de 0 ou de 1, plus de temps est consommé par le calcul. Nous avons donc fait varier ces limites (Z_{min} et $Z_{max} = 1 - Z_{min}$) jusqu'à ne plus obtenir de variation dans le calcul de $\tilde{Y}_f = \int_{Z_{min}}^{Z_{max}} Y_f(Z) P(Z) dZ$ sur un profil du domaine $x^+ = C_{te}$. Les résultats sont présentés sur la figure D.1. A l'issue de ces calculs, nous avons choisi la valeur $Z_{min} = 1.0 \times 10^{-5}$ à partir de laquelle, la forme de la courbe \tilde{Y}_f ne change pratiquement plus.

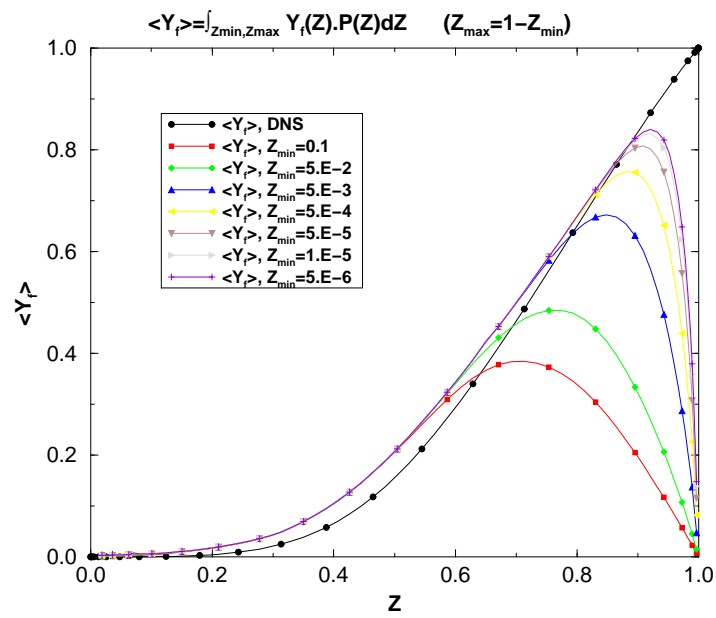


Figure D.1 : Test de convergence de la méthode d'intégration à l'aide du calcul de \tilde{Y}_f .
 $Re_t = 104.6$.

Annexe E

Analyse de sensibilités

Des calculs de sensibilité sont effectués par rapport aux différents paramètres du modèle PDFA. Des tests sur la fonction de pondération qui lie les modèles PDFA et CHI sont aussi réalisés.

E.1 Modèle PDFA

Nous avons vu que les bases pour la conception du modèle d'auto-inflammation PDFA sont solides. La formulation du modèle est soutenue par des arguments physiques clairs observés dans les simulations numériques directes. Les tests effectués sur les hypothèses du modèle montrent qu'elles sont justifiées. Cependant, l'accumulation d'erreurs dans le calcul des $Y_i(Z, \bar{c})$ semble affecter les résultats obtenus lors de l'établissement de la flamme de diffusion. Le modèle doit donc être très sensible à certains paramètres dont de légères modifications introduisent d'importantes sources d'erreur sur les résultats finaux.

Nous avons procédé à une série de tests où nous avons changé les paramètres suivants:

- La valeur de la variable d'avancement \bar{c} , ce qui implique le changement des courbes locales d'évolution des $Y_i(Z, \bar{c})$ et de $T(Z, \bar{c})$.
- La valeur de $Y_{f,eq}(Z)$ lors du calcul des $Y_i(Z, \bar{c})$, ce qui permet de garder les mêmes valeurs de \bar{c} tout en changeant les courbes $Y_i(Z, \bar{c})$ et $T(Z, \bar{c})$. La valeur de $Y_{f,eq}(Z)$ a été changée entre le calcul avec un nombre de Damköhler fini (courbes $Y_{f,eq}(Z)$) et un Damköhler infini ($Y_f^{\infty rap}$).
- La valeur du nombre de Damköhler local de la flamme, ce qui introduit des modifications directes dans le calcul de $Y_{f,eq}(Z)$, affectant ainsi le calcul de \bar{c} .

La valeur des différents paramètres est représentée sur le tableau E.1. Le cas de référence (cas 0) correspond au taux de réaction moyen intégré selon y^+ mesuré en DNS. La figure E.1 contient les résultats des calculs effectués.

E.1.1 Augmentation de \bar{c}

Dans les cas 8, 9 et 10, nous avons construit une fonction $f(\bar{c})$ dont l'objectif est l'augmentation artificielle des valeurs de \bar{c} sans toutefois dépasser la valeur limite $\bar{c} = 1$. Nous constatons que le modèle est très sensible aux changements de \bar{c} . Cependant, les fonctions $f(\bar{c})$ introduisent des changements de courbure de $\bar{\omega}(x^+)$ non vérifiés dans la DNS. Autrement, les cas 2, 3 et 6

cas	\bar{c}	$Y_F(Z, \bar{c})$	Da
1	$\bar{c}(Y_{f,eq})$	$f(Y_{f,eq})$	Da
2	1	$f(Y_{f,eq})$	Da
3	1	$f(Y_f^{\infty rap})$	Da
4	$\bar{c}(Y_{f,eq})$	$f(Y_f^{\infty rap})$	Da
5	$\bar{c}(Y_{f,eq})$	$f(Y_{f,eq})$	$10 Da$
6	1	$f(Y_{f,eq})$	$3 Da$
7	$\bar{c}(Y_{f,eq})$	$f(Y_{f,eq})$	$3 Da$
8	$\bar{c} + 7(1 - \bar{c}) \exp(-2/\bar{c})$	$f(Y_{f,eq})$	$3 Da$
9	$\bar{c} + 7(1 - \bar{c}) \exp(-2/\bar{c})$	$f(Y_{f,eq})$	$10 Da$
10	$\bar{c} + 7(1 - \bar{c}) \exp(-2/\bar{c})$	$f(Y_f^{\infty rap})$	Da

Tableau E.1 : Etude paramétrique du modèle PDFa. Valeurs des variables étudiées.

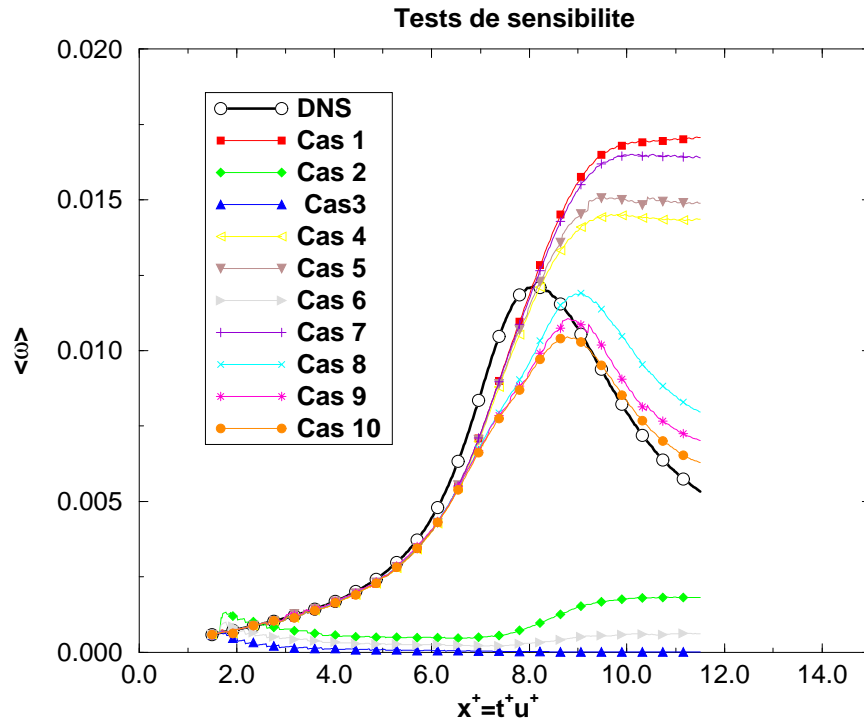


Figure E.1 : Test de sensibilité du modèle PDFa par rapport à la manière dont \bar{c} , $Y_F(Z, \bar{c})$ et Da sont calculés. Comparaisons avec la DNS. $Re_t = 104.6$.

indiquent que dans le cas où \bar{c} atteint la valeur 1 (ce qui signifie que $Y_f = Y_{f,eq}$), le taux de réaction est sous-estimé, comme prévu par la théorie asymptotique (figure 4.14).

E.1.2 Changement de $Y_f(Z, \bar{c})$

Le changement de $Y_{f,eq}$ en $Y_f^{\infty rap}$ équivaut à la condition $Da \rightarrow +\infty$ dans le calcul de $Y_f(Z, \bar{c})$ tout en gardant le vrai Da pour le calcul de \bar{c} . Comme nous le verrons ensuite, ceci nous permet de profiter des avantages de l'augmentation de Da sans en garder les inconvénients (cas 3, 4 et 10).

E.1.3 Augmentation du nombre de Damköhler

L'augmentation de Da implique que $Y_{f,eq}$ s'approche de $Y_f^{\infty rap}$ lorsque t^+ augmente et que \bar{c} descend et s'approche plus lentement de 1 (flamme de diffusion établie). Même si le fait d'avoir $Y_{f,eq}$ plus proche de $Y_f^{\infty rap}$ améliore la précision du calcul de $Y_f(Z, \bar{c})$, la diminution de \bar{c} n'aide pas la baisse du taux de réaction modélisé.

E.2 Couplage PDFA/CHI

Des tests de sensibilité ont été effectués aussi sur la fonction $f(\bar{c})$ qui sert de couplage entre les modèles PDFA et CHI. Les fonctions $f(\bar{c})$ cherchent à reproduire le comportement de $\bar{\omega}_F$ mesuré dans la DNS. Le tableau E.2 contient les différentes fonctions utilisées. Les résultats correspondent aux cas 1 à 5 de la figure E.2.

cas	1	2	3	4	5
$f(\bar{c})$	\bar{c}	$\bar{c} + 7(1 - \bar{c}) \exp^{-\frac{2}{\bar{c}}}$	$\frac{1}{2} [1 + \sin(-\frac{\pi}{2} + \pi\bar{c})]$	$\frac{1}{2} [1 + \text{erf}(-2 + 4\bar{c})]$	\bar{c}^3

Tableau E.2 : Différentes fonctions $f(\bar{c})$ utilisées pour la transition entre les modèles PDFA et CHI.

Nous constatons la grande influence de la variable d'avancement sur le comportement du modèle. Aucune des fonctions ne donne de résultats qui soient exactement pareils aux résultats de la DNS. Le meilleur compromis est atteint avec la fonction $f(\bar{c}) = \bar{c}^3$ qui a été utilisée dans les comparaisons des résultats du modèle PDFA/CHI avec les résultats des simulations numériques de couche de mélange spatiale.

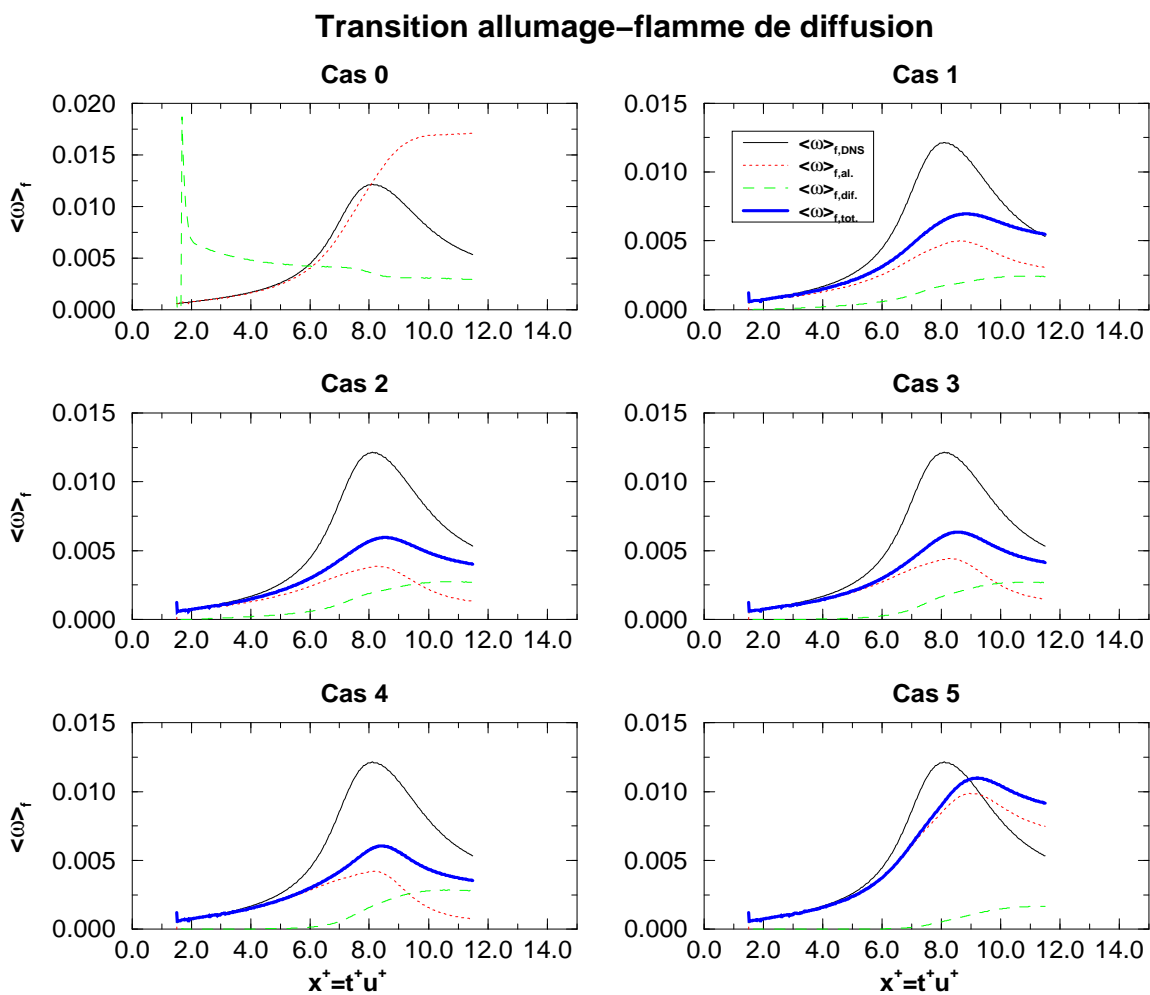


Figure E.2 : Utilisation de différentes fonctions de transition entre les modèles d'auto-allumage et de flammes de diffusion établie en chimie infiniment rapide, fondées sur les valeurs locales de la variable d'avancement \bar{c} . $Re_t = 104.6$.

Liste des tableaux

2.1	Délai d'auto-allumage et température maximale atteinte par un mélange homogène, en fonction de la richesse.	14
2.2	Différences entre les caractéristiques de la flamme de diffusion laminaire en contre-courant et les flammelettes laminaires censées représenter localement une flamme de diffusion turbulente réelle.	36
4.1	Rappel des modules et de l'ensemble du modèle d'allumage et de combustion Diesel PDFFA/CHI.	97
5.1	Les différentes étapes de la modélisation du taux de réaction.	120
5.2	Paramètres chimiques de référence du cas 1D étudié.	123
5.3	Les différents paramètres turbulents utilisés dans l'étude de sensibilité.	128
5.4	Valeurs de référence des différentes variables de l'écoulement. Toutes les autres variables s'expriment en fonction de ces variables de référence.	134
5.5	Evolution dans le temps des paramètres turbulents k et ϵ pour le calcul DNS 2D d'une couche de mélange temporelle.	135
6.1	Pressions partielles des réactifs avant la pré-combustion et proportions volumétriques des produits de la combustion. Pour une réaction adiabatique, la pression maximale atteinte est de 118 bar et la température maximale est de 1591 K (densité de 25 kg m^{-3}). Dans l'air, l'oxygène et l'azote sont dans une proportion volumétrique d'environ 21% O_2 pour 79% N_2	150
6.2	Paramètres des simulation effectuées.	156
B.1	Constantes du schéma cinétique à 4 étapes IFP.	182
B.2	Constantes du modèle à trois équations: valeurs de référence.	186
B.3	Paramètres turbulents de référence.	202
E.1	Etude paramétrique du modèle PDFFA. Valeurs des variables étudiées.	214
E.2	Différentes fonctions $f(\bar{c})$ utilisées pour la transition entre les modèles PDFFA et CHI.	215

Liste des figures

1.1	Différentes sortes de chambres de combustion caractéristiques de moteurs Diesel à injection directe. D'après Heywood.	2
1.2	Images des frontières des jets de carburant liquides et des flammes à partir de films réalisés à haute vitesse sur la combustion dans les moteurs Diesel. Premier point lumineux à 1.17 ms après le début de l'injection (SOI). D'après Heywood.	2
1.3	Dégagement de chaleur en fonction du temps après le début de l'injection. Effet de la variation de la température initiale de l'air. D'après Heywood.	3
1.4	Les différents niveaux de complexité de la modélisation de la combustion utilisés dans ce travail.	5
2.1	Délai d'allumage d'un mélange homogène n-heptane/air à 40 atm	12
2.2	Evolution de la température pendant l'auto-allumage en mélange homogène. Modèle IFP d'auto-inflammation du n-heptane.	15
2.3	Evolution du délai d'auto-allumage en fonction de la température initiale T^0 du mélange homogène air-carburant (n-heptane) à richesse $\phi = 1$. Comparaison entre les résultats obtenus avec le schéma cinétique complet de Ciezky et Adomeit ($P = 40\text{ atm}$) et avec le modèle IFP à 4 étapes d'auto-inflammation du n-heptane.	16
2.4	Evolution du délai d'auto-allumage normalisé en fonction de la fraction de mélange. Modèle IFP d'auto-inflammation du n-heptane.	16
2.5	Influence du pas de temps maximal sur l'évolution de la température lors de l'application du modèle d'auto-inflammation IFP à un mélange homogène.	17
2.6	Influence du pas de temps maximal sur l'évolution de la température lors de l'application du modèle d'auto-inflammation à un mélange homogène.	18
2.7	Composition du mélange en fonction de la fraction de mélange Z ; chimie simple et infiniment rapide. $Y_{F,0} = Y_{O,0} = 1$	26
2.8	Description de la combustion turbulente prémélangée et non prémélangée à l'aide d'une structure de flammelettes.	32
2.9	Diagramme de combustion prémélangée. D'après Peters et Borghi.	33
2.10	Diagramme de combustion turbulente prémélangée, basé sur des résultats de DNS. D'après Poinso <i>et al.</i>	34
2.11	Flamme laminaire de prémélange étirée avec écoulement des réactifs et des produits à contre-courant.	35
2.12	Température maximale de la réaction en fonction de la dissipation scalaire dans les endroits à $f = f_{st}$ pour une flamme de diffusion. Le point Q correspond à l'extinction de la flamme et le point I à un allumage spontané. D'après Peters.	42
2.13	Flamme laminaire étirée avec l'écoulement des réactifs à contre courant.	42

2.14	Représentation schématique des processus physiques présents dans le modèle à trois surfaces; a) surface de mélange séparant carburant et oxydant; b) formation d'une zone de gaz prémélangé; c) allumage et propagation d'une flamme de prémélange; d) établissement de la flamme de diffusion; e) flamme de diffusion établie.	52
2.15	Surface de flamme de prémélange et surface de flamme de diffusion. La surface de flamme de prémélange se propage par rapport à l'écoulement avec une vitesse S_l perpendiculaire au front de flamme. L'épaisseur du front de flamme l_f est petite par rapport aux échelles turbulentes. La flamme de diffusion n'a pas de vitesse caractéristique. Le taux de réaction local dépend du gradient de la fraction de mélange ∇Z	57
2.16	Représentation schématique de la structure interne de la zone de mélange et de son profil moyen. La variable x est une coordonnée spatiale caractéristique du système.	57
2.17	Flamme de prémélange se propageant à l'intérieur d'une zone de mélange après l'auto-inflammation et flamme de prémélange se propageant dans un milieu turbulent à richesse constante. L'influence de la turbulence ne se fait probablement pas sentir pendant la propagation de la flamme à l'intérieur de la zone de mélange de faible épaisseur.	60
3.1	Les trois approches différentes à la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel présentées dans le chapitre 2, ainsi que la formulation du modèle PDFA/CHI proposé dans ce chapitre.	64
3.2	Distribution des réactifs dans une maille de calcul. La concentration moyenne ne suffit pas à la description de la structure et de la quantité de mélange. . . .	66
3.3	Variation de la concentration massique de l'espèce F en fonction de la fraction de mélange Z ; évolution effective (Y_F), mélange pur sans combustion ($Y_{F,mel} \Rightarrow c = 0$) et équilibre chimique avec chimie infiniment rapide ($Y_{F,eq} \Rightarrow c = 1$). Condition limite: $Y_{F,0} = 1$	73
4.1	Domaine de calcul. Iso-contours de Z (trait épais), $Z=0.25$, $Z=0.5$, $Z=0.75$ et de vorticit� (trait normal), d'apr�s Van Kalmthout.	84
4.2	Domaine de calcul. Iso-contours de Z (trait �pais) et de vorticit� (trait normal). Calcul effectu� � Reynolds turbulent initial $Re_t = 211.0$. Les longueurs adimensionnelles selon x et y sont $L_x^+ = L_y^+ = 4.0$	85
4.3	Taux de r�action et fraction de m�lange instantan�s: Lors de l'auto-inflammation et flamme de diffusion �tablie.	85
4.4	Evolution du m�lange moyen non r�actif $\overline{Y_F Y_O}$ en DNS le long du domaine de calcul ($t^+ = x^+/U^+$ est le temps adimensionnel).	86
4.5	Bilan aux diff�rents termes de l'�quation de m�lange.	88
4.6	Fluctuations du terme de convection dans des plans adjacents.	89
4.7	Rapport entre la partie fluctuante de la dissipation scalaire et son mod�le. . . .	90
4.8	Evolution du coefficient de m�lange le long du domaine de calcul pour trois profils $t^+ = x^+/U^+$	91
4.9	Comparaison entre les mod�les de $\overline{Y_{pF}}$ et sa valeur calcul�e en DNS conditionn�e � une richesse variant entre 0.1 et 10.	92
4.10	Approximation de la <i>pdf</i> de Z par une distribution β	93
4.11	Comparaison entre la quantit� de carburant m�lang� calcul�e � partir d'un approche <i>pdf</i> pr�sum�e et mesur�e en DNS.	93

4.12	Rapport entre la densité de surface de contact à $\bar{Y}_F = 0.5$ et la dissipation scalaire sur les profils $x^+ = 1.90$, $x^+ = 2.58$ et $x^+ = 3.27$	95
4.13	Variation de la moyenne de la variable d'avancement calculée à partir de la DNS et modélisée au cours du temps adimensionnel en fonction de \bar{Z} . $Re_t = 104.6$	98
4.14	Comparaison entre les mesures instantanées des Y_i et de $\dot{\omega}_f$ à la sortie du domaine de calcul quand la flamme de diffusion est établie et les prévisions de la théorie asymptotique de Liñan. $Re_t = 104.6$ et $Re_t = 201.4$	99
4.15	Représentation en nuage de points de l'évolution de c en fonction de Z pendant les différentes réalisations du calcul DNS. Profil $\tau^+ = 1.57$, $Re_t = 104.6$	100
4.16	Fonctions densité de probabilité de c pour deux profils de calcul au début et à la fin de l'auto-inflammation, $Re_t = 104.6$	101
4.17	Fonctions densité de probabilité de Z pour des différents profils de calcul. Comparaison entre les <i>pdf</i> calculées en DNS et les <i>pdf</i> présumées à partir d'une fonction β , $Re_t = 104.6$	102
4.18	Evolution du taux de réaction moyen et de la température moyenne mesurés en DNS dans la direction de l'écoulement moyen.	103
4.19	Comparaison entre les taux de réaction moyens intégrés selon y^+ calculés par la DNS et modélisé (modèle PDFA), $Re_t = 104.6$	104
4.20	Comparaison entre les taux de réaction moyens calculés par le modèle PDFA et issus de la DNS. Les iso-lignes de la fraction de mélange sont aussi représentées. $Re_t = 104.6$	105
4.21	Profils des grandeurs intervenant dans le calcul du taux de réaction, variable d'avancement et taux de réaction à $\tau^+ = 0.71$, $Re_t = 104.6$	107
4.22	Profils des grandeurs intervenant dans le calcul du taux de réaction, variable d'avancement et taux de réaction à $\tau^+ = 1.57$, $Re_t = 104.6$	108
4.23	Comparaison entre $\overline{Y_F Y_O}$ mesurée en DNS et modélisée (modèle PDFA). Rapport entre les deux grandeurs. Corrélation entre ce rapport et le rapport des taux de réaction mesuré en DNS et modélisé, $\tau^+ = 1.57$, $Re_t = 104.6$	109
4.24	Evolution des taux de réaction moyens mesurés en DNS et calculés avec les modèles PDFA et CHI. $Re_t = 104.6$	110
4.25	Comparaison entre les taux de réaction moyens calculés par le modèle PDFA/CHI et issus de la DNS. Les iso-lignes de la fraction de mélange sont aussi représentées. La fonction de pondération est $f(\bar{c}) = \bar{c}^3$. $Re_t = 104.6$	111
4.26	Taux de réaction moyen et ses fluctuations conditionnées selon les valeurs de Z (simulation temporelle). Des courbes avant et après l'auto-inflammation sont tracées. Nous pouvons observer l'importance relative de la valeur <i>rms</i> du taux de réaction par rapport à la valeur moyenne.	113
4.27	Taux de réaction moyen: Calcul DNS; modèle PDFA/CHI; expression d'Arrhenius avec des valeurs moyennes. Chaque tranche de temps correspond à un instant de calcul. Les résultats DNS présentés sont obtenus en moyennant le taux de réaction selon la direction y^+ à l'instant choisi. Le résultat à chaque pas de temps est semblable au profil de taux de réaction moyen présenté.	114
4.28	Simulation spatiale. Taux de réaction moyen conditionné à $Z = Z_{st}$. Comparaison des évolutions pour différents niveaux de turbulence.	116
5.1	Profils initiaux de Y_F et de Y_O . Résultat de la résolution de l'équation de transport diffusif ($D = D_t$) de Y_F et de Y_O après un certain temps t petit. $x \rightarrow -\infty$, $Y_F = 1$, $Y_O = 0$; $x \rightarrow +\infty$, $Y_F = 0$, $Y_O = 1$	121

5.2	Evolution des profils de concentration de carburant et d'oxydant dans les conditions de référence du calcul unidimensionnel (tableaux 5.3 et 5.2).	124
5.3	Sensibilité du modèle PDFFA/CHI par rapport au pas de temps de calcul. La densité partielle de carburant et la température ont été suivies sur une maille au centre du domaine de calcul à environ $\tilde{Z} = 0.5$	125
5.4	Variance de la fraction de mélange pour $t = t_0$ et du taux de réaction moyen global, en fonction du nombre de mailles dans le profil initial de \tilde{Z}	126
5.5	Comportement du taux de réaction pendant la période d'auto-inflammation en fonction de l'initialisation de \tilde{Z}''^2 et des paramètres turbulents. Comparaison avec un modèle d'auto-inflammation cinétique laminaire (Arrhenius 1 étape).	127
5.6	Taux de réaction en fonction du temps, de la coordonnée x du domaine 1D, et des paramètres turbulents k et l_t . Les iso-lignes représentent la fraction de mélange moyenne \tilde{Z}	129
5.7	Evolution au cours du temps du taux de réaction moyen, intégré sur le domaine de calcul dans les différents cas turbulents.	130
5.8	Evolution au cours du temps de la probabilité de trouver $Z = Z_{st}$ en fonction de \tilde{Z} . Configuration chimique du tableau 5.3 et turbulente du cas 1 du tableau 5.2.	131
5.9	Evolution au cours du temps du taux de réaction moyen, intégré sur le domaine de calcul. $k = 1.5e^4 cm^2 s^{-2}$, $l_t = 0.05 cm$	132
5.10	Taux de réaction en fonction du temps dans le domaine de calcul. Comparaison entre les modèles PDFFA/CHI et ARR/MAG. $k = 1.5e^4 cm^2 s^{-2}$, $l_t = 0.05 cm$	132
5.11	Comparaison entre le taux de réaction moyen calculé en DNS dans le cas de la couche de mélange temporelle et celui calculé par KIVA II MB avec le modèle PDFFA/CHI. Les lignes continues représentent les valeurs moyennes de la fraction de mélange au cours du temps dans le domaine 1D.	136
6.1	Cellule de combustion haute pression avec accès optique et injecteur de gaz.	142
6.2	Caractérisation de l'injecteur: Temps d'injection.	144
6.3	Masse injectée par coup d'injection en fonction du temps d'activation du solénoïde, de la pression dans la chambre de combustion et de la pression d'injection. $D_{inj} = 0.3 mm$	146
6.4	Masse injectée par coup d'injection en fonction du temps d'activation du solénoïde, de la pression d'injection. $D_{inj} = 0.3 mm$	146
6.5	Montage optique utilisé pour la visualisation de jets gazeux par la méthode de Schlieren. 1) Laser argon ($\lambda = 488 nm$). 2) Obturateur. 3) Filtre spatial. 4) Miroir. 5) Lentille de parallélisation du faisceau laser. 6) Cellule haute pression. 7) Lentille convergente ("Schlieren"). 8) Panneaux cache. 9) Diaphragme. 10) Caméra rapide avec numériseur CCD. 11) PC de contrôle du système et de traitement d'image.	147
6.6	Séquence typique d'images acquises par films Schlieren de contours des jets de méthane. $D_{inj} = 0.25 mm$, $p_{inj} = 110 bar$, $p_{ch} = 33.6 bar$, $T_{ch} = 453 K$. Première image: 1.5 ms après l'activation du solénoïde. Dernière image: 1.5 ms après la première image.	148
6.7	Evolution de la pression et de la température dans la cellule en fonction du temps après l'allumage du prémélange décrit dans le tableau 6.1 (mélange de densité $\rho = 25 kg m^{-3}$). D'après Verhoeven.	149

6.8	Auto-inflammation et établissement de la flamme de diffusion. Intensité lumineuse émise par la combustion (mesures avec la photo-diode) et pression dans la chambre de combustion pour différentes températures initiales et pressions d'injection différentes.	151
6.9	Auto-inflammation du jet de méthane. $D_{inj} = 0.25\text{ mm}$, $p_{inj} = 160\text{ bar}$, $T_{ch} = 1200\text{ K}$. La première image est prise 10.4 ms après le début de l'activation du solénoïde.	153
6.10	Auto-inflammation du jet de méthane. $D_{inj} = 0.25\text{ mm}$, $p_{inj} = 110\text{ bar}$, $T_{ch} = 1200\text{ K}$	153
6.11	Maillage bidimensionnel utilisé et discrétisation de la zone d'injection.	154
6.12	Vitesse sur l'axe de la chambre de combustion en fonction de la coordonnée axiale ($z = 0.0\text{ cm}$ représente la sortie de l'injecteur).	157
6.13	Contours du jet de carburant obtenus par la technique Schlieren. Comparaison par rapport aux calculs réalisés avec KIVA II à travers des iso-contours de température $T_{min} = 300\text{ K}$ et $T_{max} = 473\text{ K}$. Les instants comparés sont (par rapport au temps après le début de l'injection: ADI): 1) Image 5, $t = 0.4\text{ ms ADI}$, 2) Image 7, $t = 0.6\text{ ms ADI}$, 3) Image 10, $t = 0.9\text{ ms ADI}$, 4) Image 13, $t = 1.2\text{ ms ADI}$, 5) Image 16, $t = 1.5\text{ ms ADI}$	158
6.14	Comparaison entre les délais d'auto-allumage mesurés expérimentalement par la photo-diode et calculés par le code KIVA II ($D_{inj} = 0.25\text{ mm}$, $T_{ch} = 1200\text{ K}$, $p_{ch} = 90\text{ bar}$). Sensibilité par rapport au changement de la vitesse d'injection du méthane. Paramètres chimiques utilisés: $A = 3.0 \times 10^6\text{ s}^{-1}$ et $T_a = 15000\text{ K}$. . .	159
6.15	Iso-contours de température lors de l'auto-inflammation. L'injecteur est placé en haut et à gauche de chaque image. $t = 0$ correspond au début de l'injection. Calcul 2: $D_{inj} = 0.25\text{ mm}$, $U_{inj} = 200\text{ ms}^{-1}$, $T_{ch} = 1200\text{ K}$, $p_{ch} = 90\text{ bar}$	160
6.16	Evolution du taux de réaction. Sur l'image du haut, l'auto-inflammation peut être localisée par rapport aux iso-contours de fraction de mélange. $t = 0$ correspond au début de l'injection. Calcul 2: $D_{inj} = 0.25\text{ mm}$, $U_{inj} = 200\text{ ms}^{-1}$, $T_{ch} = 1200\text{ K}$, $p_{ch} = 90\text{ bar}$	161
A.1	Limites d'intégration des équations différentielles de transport des espèces et de la température.	168
A.2	Evolutions de Y_F , Y_O et de T dans les conditions: $T_{F,0} = T_{O,0} = T_f/2$	173
A.3	Evolutions de Y_F et de Y_O sans réaction chimique.	176
B.1	Distribution de la surface de contact pour: a) $t = 5 \times 10^{-4}\text{ s}$; b) $t = 10 \times 10^{-4}\text{ s}$; c) $t = 15 \times 10^{-4}\text{ s}$	187
B.2	Evolution au cours du temps de la quantité globale de surface de contact dans la chambre de combustion.	188
B.3	Concentration de carburant prémélangé dans la chambre de combustion pour: a) $t = 9 \times 10^{-4}\text{ s}$; b) $t = 10 \times 10^{-4}\text{ s}$; c) $t = 11 \times 10^{-4}\text{ s}$; d) $t = 15 \times 10^{-4}\text{ s}$. . .	189
B.4	Evolution au cours du temps de la quantité globale de carburant et d'oxydant prémélangés dans la chambre de combustion.	189
B.5	Evolution au cours du temps de la quantité globale de carburant et d'oxydant non prémélangés. Distribution de la concentration de carburant non prémélangé dans la chambre de combustion à $t = 15 \times 10^{-4}\text{ s}$	190
B.6	Distribution de la surface de flamme de prémélange pour: a) $t = 9 \times 10^{-4}\text{ s}$; b) $t = 10 \times 10^{-4}\text{ s}$; c) $t = 14 \times 10^{-4}\text{ s}$; d) $t = 15 \times 10^{-4}\text{ s}$	191

B.7	Evolution au cours du temps de la quantité globale de surface de flamme de prémélange.	192
B.8	Consommation de carburant prémélangé.	192
B.9	Vitesse de flamme laminaire dans une maille de calcul.	193
B.10	Distribution de la surface de flamme de diffusion pour: a) $t = 12 \times 10^{-4} s$; b) $t = 13 \times 10^{-4} s$; c) $t = 15 \times 10^{-4} s$	194
B.11	Evolution au cours du temps de la quantité globale de surface de flamme de diffusion.	194
B.12	Consommation de carburant non prémélangé.	195
B.13	Champ de température dans la chambre de combustion pour: a) $t = 9 \times 10^{-4} s$; b) $t = 10 \times 10^{-4} s$; c) $t = 15 \times 10^{-4} s$	196
B.14	Dégagement d'énergie dans la chambre de combustion, basé sur la consommation totale de carburant.	197
B.15	Evolution des quantités totales de surface de flamme de diffusion, de contact et de flamme de prémélange en fonction du maillage.	198
B.16	Evolution des quantités totales de surface de flamme de diffusion, de contact et de flamme de prémélange en fonction de la constante α_i liée au terme de production des différentes surfaces.	199
B.17	Evolution des quantités totales de surface de flamme de diffusion, de contact et de flamme de prémélange en fonction de la constante β_i liée au terme de destruction des différentes surfaces.	201
B.18	Comparaison de l'évolution de la quantité de surface de contact en faisant varier la turbulence initiale.	202
B.19	Evolution du taux moyen volumique de dissipation de l'énergie cinétique turbulente, de l'énergie cinétique turbulente moyenne, et du taux volumique moyen d'étirement.	203
B.20	Distribution gaussienne de la densité initiale de surface de contact.	205
B.21	Evolution de la surface de contact pendant la phase de mélange et d'auto-allumage. Evolution des masses de carburant et d'oxydant prémélangés.	205
C.1	Evolution du nombre de Damköhler en fonction du temps de calcul. Evolution de la température maximale en fonction du nombre de Damköhler. $Da_c =$ Damköhler critique, $Da_i =$ Damköhler allumage.	208
C.2	Evolution du nombre de Damköhler caractéristique de la flamme pendant l'auto-allumage et l'établissement de la flamme de diffusion pour des intensités de turbulence différentes. Comparaison entre l'évolution du taux de réaction mesuré en DNS et du taux de réaction modélisé.	209
D.1	Test de convergence de la méthode d'intégration à l'aide du calcul de \tilde{Y}_f . $Re_t = 104.6$	212
E.1	Test de sensibilité du modèle PDFa par rapport à la manière dont \bar{c} , $Y_F(Z, \bar{c})$ et Da sont calculés. Comparaisons avec la DNS. $Re_t = 104.6$	214
E.2	Utilisation de différentes fonctions de transition entre les modèles d'auto-allumage et de flammes de diffusion établie en chimie infiniment rapide, fondées sur les valeurs locales de la variable d'avancement \bar{c} . $Re_t = 104.6$	216

Bibliographie

- [1] K. J. Colella, E. N. Balles, J. A. Ekchian, W. K. Cheng and J. B. Heywood. "A rapid compression machine study of the influence of charge temperature on Diesel combustion". SAE Paper 870587, 1987.
- [2] M. Zellat et H. Zeller. "Modélisation multidimensionnelle de l'auto-inflammation dans un moteur Diesel: premières validations expérimentales". Rapport IFP 35551, 1987.
- [3] E. Mastorakos, T. A. Baritaud, B. Cuenot and T. J. Poinso. "Numerical simulations of autoignition in turbulent flows with non-premixed reactants". *Combustion and Flame*, Vol. 109, p. 198, 1997.
- [4] A. Liñan and A. Crespo. "An asymptotic analysis of unsteady diffusion flames for large activation energies". *Combustion Science and Technology*, Vol. 14, p. 95, 1976.
- [5] U. C. Müller, H. Pitsch and N. Peters. "Modelling of ignition of high pressure sprays". *Euromech Colloquium 324, The Combustion of Drops Sprays and Aerosols*, Marseille, 1994.
- [6] U. C. Müller and N. Peters. "Development of reduced reaction schemes for ignition of Diesel fuels". IDEA Program, Internal Report, 1991.
- [7] U. C. Müller, N. Peters and A. Liñan. "Global kinetics for n-heptane ignition at high pressures". *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, p. 777, The Combustion Institute, 1992.
- [8] H. Ciezky and G. Adomeit. "Shock tube investigation of self-ignition of fuel/air mixtures under engine conditions". *Combustion and Flame*, Vol. 93, p. 421, 1993.
- [9] M. Halstead, L. Kirsh and C. Quinn. "The autoignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures. Fitting of a mathematical model". *Combustion and Flame*, Vol. 30, p. 45, 1977.
- [10] D. Thévenin. "Dynamique de l'allumage de flammes de diffusion dans des écoulements cisailés". Thèse de Doctorat d'Energétique, Ecole Centrale de Paris, 1992.
- [11] J.-M. Duclos. "Analyse du modèle de flamme cohérente fondée sur l'étude expérimentale d'une flamme turbulente prémélangée stationnaire. Application aux moteurs automobiles à allumage commandé". Thèse de Doctorat d'Energétique, Ecole Centrale de Paris, 1997.
- [12] E. Mastorakos, A. P. da Cruz, T. A. Baritaud and T. J. Poinso. "A simple model for the effects of mixing on the autoignition of turbulent flows". *Combustion Science and Technology*, Vol. 125, p. 243, 1997.

- [13] K. N. Lakshmisha, B. Brogg and K. N. Bray. "PDF modelling of autoignition in nonpremixed turbulent flows". *Combustion Science and Technology*, Vol. 105, p. 229, 1995.
- [14] R. L. Curl. "Dispersed phase mixing: I. Theory and effects in simple reactors". *A.I.Ch.E. Journal*, Vol. 9, No. 2, p. 181, 1962.
- [15] Y. Zhang, B. Rogg and K. N. C. Bray. "2-D simulation of turbulent autoignition with transient laminar flamelet source term closure". *Combustion Science and Technology*, Vol. 105, p. 211, 1995.
- [16] R. W. Bilger. "Turbulent Reacting Flows". Edited by P. A. Libby and F. A. Williams, Springer-Verlag, 1980.
- [17] K. K. Kuo. "Principles of combustion". Wiley-Interscience, 1986.
- [18] F. A. Williams. "Combustion Theory". Addison-Wesley, 1988.
- [19] R. W. Bilger. "The structure of diffusion flames". *Combustion Science and Technology*, Vol. 13, p. 155, 1976.
- [20] A. Liñan. "The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies". *Acta Astronautica*. Vol. 1, p. 1007, 1974.
- [21] B. Cuenot. "Etude asymptotique et numérique de la structure des flammes de diffusion laminaires et turbulentes". Thèse en mécanique des fluides, Institut National Polytechnique de Toulouse, 1995.
- [22] N. Peters. "Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion". *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 10, p. 319, 1984.
- [23] N. Peters. "Laminar flamelet concepts in turbulent combustion". *Twenty-First Symposium (International) on Combustion*, p. 1231, The Combustion Institute, 1986.
- [24] S. K. Liew, K. N. C. Bray and J. B. Moss. "A stretched laminar flamelet model of turbulent nonpremixed combustion". *Combustion and Flame*, Vol. 56, p. 199, 1984.
- [25] F. Fichot, D. Schreiber, F. Lacas, D. Veynante and B. Yip. "New flamelet approach to model the transient phenomena following ignition in a turbulent diffusion flame". *Progress in Astronautics and Aeronautics*, Vol. 151, p. 331, 1991.
- [26] F. E. Marble and J. E. Broadwell. "The coherent flame model for turbulent chemical reactions". Project Squid, Technical report TRW-9-PU, 1977.
- [27] I. M. Kennedy and J. H. Kent. "Measurements of a conserved scalar in turbulent jet diffusion flames". *Seventeenth Symposium (International) on Combustion*, p. 279, The Combustion Institute, 1979.
- [28] S. B. Pope. "PDF Methods for turbulent reacting flows". *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 11, p. 119, 1985.
- [29] L. Vervisch. "Prise en compte d'effets de cinétique chimique dans les flammes de diffusion turbulentes par l'approche fonction densité de probabilité". Thèse de doctorat de Physique, Faculté des Sciences de l'Université de Rouen, 1991.

- [30] D. C. Haworth and S. B. Pope. "Monte Carlo solution of a joint PDF equation for turbulent flows in general orthogonal coordinates". *J. of Comp. Phys.*, Vol. 72, p. 311, 1987.
- [31] D. C. Haworth and S. B. Pope. "A PDF modeling study of self-similar turbulent free shear flows". *Physics of Fluids*, 30 (4), 1987.
- [32] T. Poinso, D. Veynante and S. Candel. "Quenching processes and premixed turbulent combustion diagrams". *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 228, p. 561, 1991.
- [33] R. Borghi. "Turbulent Combustion modelling". *Prog. Energy Combust. Sci.*, Vol. 14, p. 245, 1988.
- [34] D. B. Spalding. "Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames". Thirteenth Symposium (International) on Combustion, p. 649, The Combustion Institute, 1971.
- [35] K. N. C. Bray and J. B. Moss. *Acta Astronautica*, Vol. 4, p. 291, 1977.
- [36] P. A. Libby and K. N. C. Bray. *AIAA Journal*, Vol. 15, p. 1186, 1981.
- [37] K. N. C. Bray, M. Champion and P. A. Libby. "Turbulent Reacting Flows, Lecture notes in Engineering". 40, Springer Verlag, 1989.
- [38] K. N. C. Bray, J. B. Moss and P. A. Libby. *Combustion and Flame*, Vol. 61, p. 87, 1987.
- [39] K. N. C. Bray and P. A. Libby. "Recent developments in the BML model of premixed turbulent combustion". *Turbulent Reacting Flows*, p. 115, 1994.
- [40] A. Trouvé. *Cours de combustion*, ENSPM, 1995.
- [41] N. Darahiba, V. Giovangigli, A. Trouvé, S. Candel and E. Esposito. "Coherent flame description of turbulent premixed ducted flames". *Proceedings of the France-USA joint Workshop on Turbulent Combustion*. In *Turbulent Reacting Flows*, Springer Verlag, p. 591, 1987.
- [42] S. B. Pope. "Evolution of surfaces in turbulence". *International Journal of Engineering Sciences*, Vol. 26, p. 445, 1988.
- [43] S. M. Candel, and T. J. Poinso. "Flame stretch and the balance equation for the flame area". *Combustion Science and Technology*, Vol. 70, p. 1, 1990.
- [44] A. Trouvé and T. Poinso. "The evolution equation for the surface density in turbulent premixed combustion". *J. Fluid Mech.*, Vol. 278, p. 1, 1994.
- [45] L. Vervisch, E. Bidaux, K. N. C. Bray and W. Kollmann. "Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches". *Physics of Fluids*, Vol. 7 (10), p. 2496, 1995.
- [46] P. Boudier, S. Henriot, T. Poinso and T. Baritaud. "A model for turbulent flame ignition and propagation in spark ignition engines". *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, p. 247, The Combustion Institute, 1992.
- [47] J. M. Duclos, D. Veynante and T. Poinso. "A Comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion". *Combustion and Flame*, Vol. 95, p. 101, 1993.

- [48] C. Franke and N. Peters. Proc. SFB, Vol. 224, p. 126, 1988.
- [49] T. Mantel and R. Borghi. 13th ICDERS, 1991.
- [50] B. Rogg. Turbulent Shear Flows, 26.1.1-261.1.6, 1989.
- [51] R. S. Cant, S. B. Pope and K. N. C. Bray. Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, p. 809, 1991.
- [52] C. Meneveau and T. Poinso. "Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion". Combustion and flame, Vol. 86, p. 311, 1991.
- [53] "Modèle de flamme cohérente. Rapport d'activité 1993-1994". Rapport IFP No. 42221, 1995.
- [54] J. M. Duclos, G. Bruneaux and T. A. Baritaud. "3D Modeling of combustion and pollutants in a 4-valve SI Engine; Effect of fuel and residuals distribution and spark location". SAE Paper 961964, October, 1996.
- [55] F. A. Williams. "Turbulent mixing in non-reactive and reactive flows". S. N. B. Murthy Ed., p. 189, Plenum, 1975.
- [56] R. W. Bilger. "Turbulent diffusion flames". Ann. Rev. Fluid Mech., Vol. 21, p. 101, 1989.
- [57] R. W. Bilger. "The structure of non-premixed flames". Twenty-Second Symposium (International) on Combustion, p. 475, The Combustion Institute, 1988.
- [58] M. D. Smooke, I. K. Puri and K. Seshadri. "A comparison between numerical calculations and experimental measures of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air". Twenty-First Symposium (International) on Combustion, p. 1783, The Combustion Institute, 1986.
- [59] G. Dixon-Lewis. "Structure of laminar flames". Twenty-Third Symposium (International) on Combustion, p. 305, 1990.
- [60] B. Cuenot and T. Poinso. "Asymptotical and numerical study of diffusion flames with variable Lewis number and finite rate chemistry". Submitted to Combustion and Flame, 1994.
- [61] H. Tsuji. "Counterflow diffusion flames". Prog. in Energy Combustion Sci., Vol. 8, p. 93, 1982.
- [62] H. Pitsch, Y. P. Wan and N. Peters. "Numerical investigation of Soot formation and oxidation under Diesel Engine conditions". SAE Paper 952357, October, 1995.
- [63] H. Pitsch, H. Barths and N. Peters. "Three-dimensional modeling of NO_x and soot formation in DI-Diesel Engines using detailed chemistry based on the Interactive Flamelet approach". SAE Paper 962057, October, 1996.
- [64] D. Veynante. "Etude théorique et expérimentale d'une zone de mélange réactive". Thèse de DDI, Ecole Centrale de Paris, 1985.
- [65] F. Lacas. "Modélisation et simulation numérique de combustion dans les moteurs fusées cryotechniques". Thèse de Doctorat d'Energétique, Ecole Centrale de Paris, 1989.

- [66] F. Fichot. "Modélisation de l'allumage d'une flamme de diffusion turbulente. Application aux moteurs-fusées cryotechniques". Thèse, EM2C, Ecole Centrale de Paris, 1994.
- [67] S. Candel, D. Veynante, F. Lacas, N. Darabiha and C. Rolon. "Current progress and future trends in turbulent combustion". *Combustion Science and Technology*, Vol. 98, p. 245, 1994.
- [68] E. van Kalmthout. "Stabilisation et modélisation des flammes turbulentes non prémélangées. Etude théorique et simulations directes." Thèse de Doctorat d'Energétique, Ecole Centrale de Paris, 1996.
- [69] T. A. Baritaud, T. A. Heinze and J. F. Le Coz. "Spray and self-ignition visualisation in a DI Diesel engine". SAE Paper 940681, February, 1994.
- [70] J. E. Dec and C. Espey. "Ignition and early soot formation in a DI Diesel engine using multiple 2-D imaging diagnostics". SAE Paper 950456, February, 1995.
- [71] B. F. Magnussen and B. H. Hjertager. "On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion". Sixteenth Symposium (International) on Combustion, p. 719, The Combustion Institute, 1976.
- [72] P. Pinchon. "Three dimensional modelling of combustion in a prechamber Diesel engine". SAE Paper 890666, March, 1989.
- [73] J. Abraham, F. V. Bracco and R. D. Reitz. "Comparisons of computed and measured premixed charge engine combustion". *Combustion and Flame*, Vol. 60, p. 309, 1985.
- [74] S. C. Kong, Z. Han and R. D. Reitz. "The development and application of a Diesel ignition and combustion model for multidimensional engine simulation". SAE Paper 950278, February, 1995.
- [75] M. P. Musculus and C. J. Rutland. "An application of the coherent flamelet model to Diesel engine combustion". SAE Paper 950281, February, 1995.
- [76] D. Veynante, F. Lacas and S. M. Candel. "Numerical simulation of the transient ignition regime of a turbulent diffusion flame". *AIAA Journal*, Vol. 29, Number 5, p. 848, 1991.
- [77] B. Dillies. "Contribution à la modélisation de la combustion turbulente; application à la combustion dans les moteurs Diesel". Thèse de Doctorat d'Energétique, Ecole Centrale de Paris, 1995.
- [78] B. Dillies, K. Marx, J. Dec and C. Espey. "Diesel engine combustion modeling using the coherent flame model in KIVA II". SAE Paper 930074, March, 1993.
- [79] M. Metghalchi and J. C. Keck. "Burning velocities of air mixtures with Methanol, Isooctane, and Indolene at high pressure and temperature". *Combustion and Flame*, Vol. 48, p. 191, 1982.
- [80] J. B. Heywood. "Internal combustion engine fundamentals". McGraw-Hill, 1988.
- [81] J. Dec. "A conceptual model of DI Diesel combustion based on laser-sheet imaging". SAE paper 970873, 1997.

- [82] P. Domingo and L. Vervisch. "Triple flames and partially premixed combustion in autoignition of non premixed turbulent mixtures". Submitted to the 26th. Int. Symp. on Combustion, 1996.
- [83] T. Poinso, D. Veynante, A. Trouvé and G. Ruetsch. "Turbulent flame propagation in partially premixed flames". Center for Turbulent Research, Proceedings of the summer program, 1996.
- [84] D. Veynante. Communication personnelle, 1996.
- [85] J. Janicka and W. Kollmann. "A two variables formalism for the treatment of chemical reactions in turbulent H_2 -air diffusion flames". Seventeenth Symposium (International) on Combustion, p. 421, The Combustion Institute, 1979.
- [86] T. Poinso, D. Veynante, A. Trouvé and G. Ruetsch. "Turbulent flame propagation in partially premixed flames". Center for Turbulent Research, proceedings of the summer program, 1996.
- [87] C.-S. Chang, Y. Zhang, K. N. C. Bray and B. Rogg. "Modelling and simulation of autoignition under simulated Diesel-engine conditions". Combustion Science and Technology, Vol. 113-114, p. 205, 1996.
- [88] A. Liñan and F. A. Williams. "Ignition in an unsteady mixing layer subject to strain and variable pressure". Combustion and Flame, Vol. 95, p. 31, 1993.
- [89] A. Liñan and F. A. Williams. "Autoignition of nonuniform mixtures in chambers of variable volume". Combustion Science and Technology, Vol. 105, p. 245, 1995.
- [90] T. Baritaud, T. Poinso and M. Baum. "Direct numerical simulation for turbulent reacting flows". Ed. Technip, 1996.
- [91] A.A. Amsden, P. J. O'Rourke and T. D. Butler. "KIVA II: A computer program for chemically reactive flows with sprays". Los Alamos National Laboratory report LA-11560-MS, 1989.
- [92] C. Habchi et A. Torres. "A 3D multi-block structured version of the KIVA 2 code". Computational Fluid Dynamics'92, Vol. 1, p. 533, 1992.
- [93] C. Westbrook and F. Dryer. "Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames". Combustion Science and Technology, Vol. 27, p. 31, 1981.
- [94] R. A. Fraser, D. L. Siebers, S. S. Di Julio and C. K. Westbrook. "Autoignition of methane and natural gas in a simulated Diesel environment". SAE paper 910227, 1991.
- [95] J. D. Naber, D. L. Siebers, J. A. Caton, C. K. Westbrook and S. S. Di Julio. "Natural gas autoignition under Diesel conditions: Experiments and chemical kinetic modeling". SAE Paper 942034, October, 1994.
- [96] L. Lambert. "Modélisation des jets d'injection haute pression des moteurs Diesel et validation expérimentale". Thèse de Doctorat d'Energétique, Ecole Centrale de Paris, 1996.
- [97] D. Verhoeven. "Etude du jet et de la combustion en injection directe Diesel". Rapport IFP 42222, 1995.

-
- [98] D. Verhoeven, J. L. Vanhemelryck and B. Algourdin. "Analyse détaillée des jets Diesel". Rapport IFP 43661, 1997.
- [99] J. Abraham. "What is adequate resolution in the numerical computations of transient jets?". SAE paper 970051, 1997.
- [100] R. Comolet. "Mécanique expérimentale des fluides. Tome 1: Statique et dynamique des fluides non visqueux". Ed. Masson, 1986.
- [101] E. H. James. "Laminar burning velocities of iso-octane/air mixtures. A literature review". SAE Paper 870170, February, 1987.