



HAL
open science

Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration : Rôle de la stratification et des EGR

Catherine Gruselle

► **To cite this version:**

Catherine Gruselle. Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration : Rôle de la stratification et des EGR. Mécanique des fluides [physics.class-ph]. INSA de Rouen, 2014. Français. NNT : 2014ISAM0003 . tel-01005306

HAL Id: tel-01005306

<https://theses.hal.science/tel-01005306>

Submitted on 12 Jun 2014

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.



RENAULT



THÈSE

présentée par

Catherine Gruselle

Pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

Discipline : Énergétique
Spécialité : Mécanique des Fluides
Formation doctorale : Sciences Physiques, Mathématiques
et de l'Information pour l'Ingénieur
Laboratoire d'accueil : CORIA UMR-6614
Entreprise : Renault

Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration. Rôle de la stratification et des EGR.

soutenue le 22 janvier 2014

Membres du jury :

Rapporteurs :

Denis Veynante Directeur de Recherche, EM2C
Christian Angelberger Expert - Chef de projet, IFPEN

Examineurs :

Xue-Song Bai Professeur, LTH (Suède)
Armelle Cessou Directeur de recherche, CORIA
Perrine Pepiot Professeur, Cornell University (USA)
Yves D'Angelo Professeur, INSA de Rouen (directeur de thèse)
Vincent Moureau Chargé de recherche, CORIA (encadrant)

Invité :

Frédéric Ravet Ingénieur expert, Renault

Abstract

This Ph. D thesis deals with the study of flame kernel development in a stratified mixture in terms of equivalence ratio or dilution by recirculating burnt gases. Such flames regimes occur in many applications such as automotive engines in order to reduce pollutant emissions. However, they are less understood than classical premixed or diffusion regimes.

A first part of the study is focused on the laminar flame kernel development in homogeneous and heterogeneous mixtures. In order to discriminate differential diffusion effects from the flame dynamics, two chemistry modeling are compared. On the one hand, complex chemistry, implemented during this Ph. D, which relies on the transport of all the species. On the other hand, a tabulated chemistry approach based on the FPI (Flame Prolongation of ILDM) method. In an effort to reduce simulation time when complex chemistry is used, a new mechanism for propane/air combustion has been developed and validated with Prof. P. Pepiot from Cornell University. 1D and 2D stratified combustion simulations show that differential diffusion effects are negligible on the flame dynamics. Memory effect, which tends to increase or decrease unstretched laminar flame speed as a function of stratification direction, which has been observed experimentally (Ra *et al.*, 1999) and numerically (Pires da Cruz *et al.*, 2000), is found in the simulation with the two chemistry models. This effect is visible while the reaction zone is subjected to equivalence ratio gradient. On top of that, a dynamic motion has been highlighted in the burnt gases of stratified flames. Indeed, all kernel flamelets do not have the same impulsion. A simplified model based on surface ratio enables to predict this dynamics as well as absolute flame speed.

A second part of the study is related to the analysis of a turbulent stratified flame. To this aim, the experimental study of S. Balusamy (Balusamy, 2010) performed at the CORIA laboratory is reproduced numerically using the LES approach and PCM-FPI combustion model. In the experimental configuration, a turbulent stratified propane/air flame is propagating in a closed volume. The reproducibility of the unsteady injection, the achievement of a stratified mixture as well as the flame propagation thanks to the FPI formulation is demonstrated. A method based on level-set functions to measure absolute flame speed is developed and validated. This tool combined to spherical harmonics analysis enables to show the dependency of absolute flame speed to the different flow perturbations. To finish, an analysis of the burnt gas dynamics similar to laminar cases is led.

This work is concluded by the simulation of laminar flame kernels encountering a mixture diluted by recirculating burnt gases. Comparisons are performed between propagation in mixture with equivalence ratio stratification and diluted with recirculating burnt gas mixtures in terms of flame dynamics.

Keywords : Stratification - Detailed chemistry - Large Eddy Simulation - Partially premixed flames - Burnt gas dilution

Résumé

Cette thèse porte sur l'étude du développement de noyaux de flamme dans des milieux stratifiés. Cette stratification prend la forme de gradients de richesse ou de dilution par des gaz d'échappement recirculants. De tels régimes de combustion sont en effet présents dans de nombreuses applications, telles que des moteurs automobiles pour réduire les émissions polluantes, mais leur compréhension reste plus limitée que celle des régimes classiques de prémélange ou de diffusion.

Une première partie de l'étude s'intéresse au développement d'un noyau de flamme laminaire en milieux homogène et stratifié. Pour discriminer les effets de diffusion différentielle, deux représentations de la chimie sont comparées. D'une part la chimie complexe, implantée pendant cette thèse, qui repose sur le transport de l'ensemble des espèces du mélange, et d'autre part une approche de chimie tabulée basée sur la méthode FPI (Flame Prolongation of ILDM). Pour réduire le temps des simulations en chimie complexe, un nouveau schéma cinétique pour la combustion propane/air a été développé et validé avec le Prof. P. Pepiot de l'Université de Cornell. Les simulations 1D et 2D de combustion stratifiée montrent que les effets de diffusion différentielle sont négligeables sur la dynamique de flamme. L'effet mémoire, qui tend à augmenter ou diminuer la vitesse de flamme laminaire non-étirée en fonction du sens de la stratification, qui a été observé expérimentalement (Ra *et al.*, 1999) et numériquement (Pires Da Cruz *et al.*, 2000), est retrouvé dans les simulations avec les deux modèles de combustion. Cet effet est visible tant que la zone de réaction est soumise à un gradient de richesse. Par ailleurs, les flammes stratifiées présentent une dynamique dans les gaz brûlés intéressante. Celle-ci provient du fait que toutes les flammelettes qui composent le noyau n'ont pas la même impulsion. Un modèle simple basé sur des bilans surfaciques permet de prédire cette dynamique ainsi que la vitesse absolue de la flamme.

Une seconde partie de l'étude porte sur l'analyse d'une flamme stratifiée turbulente. Pour cela, l'étude expérimentale de S. Balusamy (Balusamy, 2010) réalisée au CORIA est modélisée avec l'approche LES et le modèle de combustion PCM-FPI. Dans cette configuration expérimentale, une flamme stratifiée turbulente propane/air se propage dans une enceinte à volume constant. La reproductibilité d'une injection instationnaire, de la réalisation d'un mélange stratifié ainsi que de la propagation de la flamme grâce à la formulation FPI est démontrée. Une méthode basée sur une fonction level-set pour mesurer la vitesse absolue de telles flammes est développée et validée. Cet outil combiné à une analyse des harmoniques sphériques permet de montrer la dépendance de la vitesse absolue aux différentes perturbations de l'écoulement. Enfin, une analyse de la dynamique des gaz brûlés similaire au cas laminaire est menée.

Ces travaux se terminent par des simulations de flammes laminaires rencontrant des mélanges dilués par des gaz brûlés recirculants. Des comparaisons sont faites entre une propagation dans un milieu stratifié en richesse et un milieu dilué en gaz brûlés recirculants en termes de dynamique de flamme.

Mots-clés : Stratification - Chimie détaillée - Simulation aux grandes échelles - Flammes partiellement prémélangées - Dilution en gaz brûlés

Remerciements

En premier lieu, je souhaite remercier les membres du jury de thèse pour l'attention portée à mon travail. Je tiens tout particulièrement à remercier Denis Veynante et Christian Angelberger d'avoir accepté la tâche de rapporteurs, ainsi que Xue-Song Bai et Perrine Pépiot d'avoir parcouru tant de distance pour assister à ma soutenance. Merci à Armelle Cessou qui m'a de plus permis de me lancer dans cette thèse avec de solides données, et à Frédéric Ravet pour le suivi industriel.

Je propose maintenant de remonter 12 ans en arrière, et de se laisser bercer par le doux clapotis de l'eau...

Le sol, la terre ferme... puis, à force d'écouter un vieux loup de mer, la passion est arrivée. Un énorme merci à M. Pascal Routier sans qui tout cela n'aurait jamais vu le jour. Jamais je n'oublierai les cours de mathématiques avec Thalès le chien, Pythagore le voisin curieux, le chat pitre, et les têtes d'Astérix... Armée de ses précieux conseils, il m'envoya débiter ce voyage. Tout d'abord sur l'étang, afin d'acquiescer les bases de la navigation.

Sur l'étang certaines aides furent bien utiles, je tiens donc à remercier Caliméro et Grosrats sans qui mes dissertations de français et mes DMs de maths auraient été différents... Grand merci à Eli, Gugur, Dédé, Sylvain qui auront égayé nombres de week-end pongistiques. Merci aussi à mon second club, Touffreville-la Corbeline et en particulier à Ju et Jean-Michel.

L'étang étant devenu trop petit, trop calme pour le matelot qui se formait en moi, on me proposa d'aller sur un lac. Là pendant 2 ans, j'ai testé plusieurs sortes d'embarcations avec une sacrée bande de marins d'eau douce, jusqu'à décider sur laquelle je voulais voguer... Mes BOA - Chicha, Feïdou, Aline - et mon Daminou, merci pour ces années de délires que nous avons eues. Des amphigames qui sans vous auraient été... trop calmes.

Suivirent 3 ans de tempête qui m'envoyèrent vers un autre pays, avec un retour aux sources pour le départ d'une nouvelle aventure. Heureusement, des explorateurs passant par là et me voyant tourmentée m'ont aidée à me hisser de nouveau sur mon bateau et à voir des horizons plus lointains, encore inconnus... Enorme merci à ma Ju...

J'avais été prévenue, pour parcourir la rivière, il faudra être tenace, aller au bout de ses forces pour contrer ce courant. Mais je n'étais pas seule, d'autres joyeux matelots réalisaient le même voyage, la même expérience, et c'est ensemble, solidaires, que nous avançons. Chaque année les matelots ont changé, alors je risque d'en oublier : David, Elise, Cindy, Mathias, Guillaume, Benoit, Suresh, Dounia, Camille, Martin, Pierre, Charles, Chloé, Sébastien, Thomas, Sarah, Edouard, Thomas, Fanny, Lisa, Lola, Xavier, Benjamin, Bastien, Eurielle, Nicolas, Dorian... De plus, durant cette traversée, nous étions merveilleusement guidés et aidés. Je crois que je ne pourrais jamais assez vous remercier. En effet, on nous fournissait tout ce dont nous avons besoin, bouts (cordes), voiles, de nouvelles embarcations... On nous envoyait même à l'autre bout du monde si cela pouvait compléter notre apprentissage... Tout d'abord merci à David Taieb pour

le soutien moral, l'aide scientifique et sa présence toujours dynamisante. Merci aussi à Guillaume Ribert qui a réussi à me convaincre d'aller jusqu'au bout et qui avait toujours une oreille attentive. Merci à Armelle Cessou et Bertrand Lecordier pour les échanges entre expérimentateurs et numériques qui m'ont permis de mieux appréhender mon sujet et sa problématique. Encore merci à Frédéric Ravet pour son enthousiasme lors de ses venues où l'on discutait des résultats présents et à venir, merci d'avoir soutenu cette thèse, d'avoir su guider l'étude pour arriver à des situations industrielles. Un merci tout particulier à Ghislain Lartigue pour avoir réparé toutes les erreurs que je pouvais commettre. Merci d'avoir été toujours présent lors de mes appels à l'aide. Petit Padawan remercie maître Jedi. Comment dire merci à celui qui m'a repêchée ? Merci à Vincent Moureau de m'avoir guidée pendant ces trois ans et de m'avoir fait découvrir énormément de terres nouvelles. Je ne pensais pas élargir mon horizon aussi loin. A l'autre bout du monde, j'ai aussi des gens à remercier, pour leur gentillesse, leur hospitalité et tout ce que j'ai pu apprendre grâce à eux. Enorme merci à Perrine Pépiot et Olivier Desjardins. Ghislain, Vincent et Perrine, je vous adresse mes plus chaleureux remerciements. Merci de m'avoir guidée pendant ces trois années. Impossible de ne pas être motivée lorsqu'on voit la passion qui vous habite et que vous arrivez à nous transmettre. Toujours présents au niveau scientifique et humain, vous avez réussi à faire grandir le petit Padawan que j'étais. Une thèse est une vraie aventure humaine, semée d'embûches, mais grâce à vous, j'ai réussi à grandir et à les surmonter. J'espère que cette aventure transformée en amitié va se poursuivre encore et encore...

Quand le temps me le permettait, je me posais sur les bords de la rivière...et là je n'étais jamais seule. Merci à tous ceux qui m'ont supportée, et qui ont même pris le temps de regarder mes flammes et mes travaux : Xavier, Olivier, Philippe...et à ceux qui ne voulaient pas entendre parler de poulet rôti : Florent, Charlène, Simon, Nicolas, Emilie et la famille Rade.

Je ne peux pas finir ces remerciements sans dire merci à mes parents et à ma grande sœur qui m'ont mis sur cette embarcation, qui m'ont vu dessaler puis me redresser et à celui qui m'a trouvée voguant au milieu de nulle part, qui m'a aidée à hisser la grand-voile pour regarder loin vers de nouveaux horizons.... Un énorme merci à vous d'être toujours là.

Ce chemin sur la rivière aura duré 3 ans, je crois que mon apprentissage est maintenant achevé. Je ne peux pas oublier cette promesse : une énorme pensée pour ce vieux loup de mer, sans qui rien n'aurait pu s'accomplir. . .

Table des Matières

1	Contexte de l'étude	17
1.1	Introduction	17
1.2	Fonctionnement général du moteur à combustion interne	18
1.3	Impact sur l'environnement et normes en vigueur	19
1.4	Post-traitement des polluants	20
1.5	Nouvelles technologies moteur	21
1.5.1	Le moteur HCCI	21
1.5.2	Le moteur à injection directe, modes mixtes	22
1.5.3	La vanne EGR	23
1.5.4	La distribution variable	24
1.6	Objectifs et plan de la thèse	25
2	Revue des analyses de flammes en propagation dans un milieu stratifié	27
2.1	Introduction	27
2.2	Classification de la stratification et structure générale de la flamme	29
2.3	Influence de la stratification sur la topologie de la flamme	30
2.3.1	Epaisseur de la flamme	30
2.3.2	Plissements et densité de surface de flamme, réaction à la courbure	31
2.4	Distribution de mélange et évolution des espèces	33
2.4.1	Effet de la distribution de mélange sur la production de NO_x	33
2.4.2	Diffusion différentielle, évolution des espèces	35
2.5	Vitesses de flamme et limites d'inflammabilité	36
2.5.1	Etudes expérimentales	36
2.5.2	Etudes numériques	38
2.6	Flammes stratifiées à contre-courant	39
2.7	Résumé sur la stratification	41
2.8	Prise en compte des gaz brûlés	41
2.8.1	Modifications des caractéristiques de la combustion par les EGR	41
2.8.2	Impact de la composition des EGR sur la combustion	42
2.8.3	Stratification gaz frais/EGR	43
2.8.4	Effets des hétérogénéités des résidus de gaz brûlés.	45
2.9	Conclusion	46
3	Outils de modélisation et d'analyses	47
3.1	Introduction	47
3.2	Equations régissant l'aérothermochimie	48
3.2.1	Equations de Navier-Stokes	48

3.2.2	Approximation à faible nombre de Mach	49
3.3	Propriétés du mélange et thermodynamique	50
3.3.1	Propriétés du mélange	50
3.3.2	Thermodynamique	51
3.3.3	Flux diffusifs	53
3.3.4	Résultats de la théorie de la cinétique des gaz	54
3.3.5	Calcul de la viscosité de cisaillement du mélange	57
3.3.6	Calcul de la conductivité thermique du mélange	57
3.3.7	Calcul des coefficients de diffusion de mélange moyennés	57
3.4	Chimie détaillée	58
3.4.1	Réaction globale	58
3.4.2	Classification des réactions chimiques	59
3.4.3	Raideur d'un système chimique	61
3.4.4	Variables caractéristiques d'une flamme	63
3.4.4.1	Richesse et fraction de mélange	63
3.4.4.2	Variable de progrès	65
3.5	Modélisation de la chimie	66
3.5.1	Schéma globaux	66
3.5.2	Chimie tabulée	66
3.5.2.1	Intrinsic Low Dimensional Manifold	67
3.5.2.2	In situ adaptive tabulation	68
3.5.2.3	Flamelet generated manifold et Flame Prolongation of ILDM	68
3.6	Introduction à la turbulence	70
3.6.1	Echelles et nombres caractéristiques de la turbulence	70
3.6.2	Modélisation de la turbulence	72
3.6.2.1	DNS-LES-RANS	72
3.6.2.2	Modèles de turbulence	73
3.6.2.3	Modélisation de la combustion turbulente	74
3.6.3	Prise en compte de la turbulence dans la modélisation de la chimie	74
3.6.3.1	Modèle PCM-FPI	74
3.6.3.2	F-TACLES	76
3.7	Extension à la combustion stratifiée	76
3.8	Vitesses de flamme	77
3.8.1	Vitesses d'une flamme plane laminaire non étirée	78
3.8.2	Vitesses d'une flamme sphérique en expansion	80
3.8.3	Vitesse turbulente	82
3.9	Conclusion	82
4	Etude de l'expansion d'un noyau de flamme laminaire	85
4.1	Introduction	85
4.2	Mise en place d'un schéma cinétique réduit	86
4.2.1	Présentation des méthodes DRG et DRGEP	87
4.2.2	Application de la méthode DRGEP	89
4.2.3	Validation du schéma réduit	90
4.2.4	Méthodologie pour son utilisation avec YALES2	92
4.2.5	Variable de progrès et génération de la table chimique	95
4.3	Présentation des simulations	96
4.3.1	Cas étudiés	97
4.3.2	Etablissement du noyau de flamme	98

4.4	Propagation mono-dimensionnelle	99
4.4.1	Présentation de la configuration	99
4.4.2	Evolution des fractions massiques	100
4.4.3	Evolution de la vitesse de flamme	104
4.5	Propagation bi dimensionnelle	106
4.5.1	Présentation de la configuration	106
4.5.1.1	Domaine et maillage	106
4.5.1.2	Conditions initiales et conditions limites	107
4.5.2	Particularité du cas $C1$	108
4.5.3	Evolution de la forme du noyau de flamme	109
4.5.4	Diffusion des espèces	112
4.5.5	Vitesse de flamme	116
4.5.6	Effet de l'étirement	120
4.5.7	Dynamique dans les gaz brûlés	123
4.5.7.1	Mise en évidence de la dynamique dans les gaz brûlés	123
4.5.7.2	Observations et hypothèses	123
4.5.7.3	Conditions de saut à travers un front de flamme	125
4.5.7.4	Modèle pour prédire la dynamique des gaz brûlés	126
4.6	Modifications de la configuration	129
4.6.1	Prise en compte d'une vitesse axiale	129
4.6.2	Influence de l'épaisseur du gradient	132
4.7	Conclusion	135
5	Expansion d'un noyau de flamme turbulent	137
5.1	Introduction	137
5.2	Présentation de l'étude	138
5.2.1	Configuration expérimentale	138
5.2.2	Caractéristiques et mise en place de l'étude	139
5.2.3	Maillage	139
5.3	Réalisation du mélange	141
5.3.1	Vitesse d'injection	141
5.3.2	Richesse injectée	143
5.3.3	Variation de température et de pression pendant l'injection	143
5.3.4	Injection de la turbulence	146
5.4	Méthodes numériques pour la combustion	147
5.4.1	Table chimique	147
5.4.2	Conditions limites et initialisation du noyau	148
5.4.3	Mesure de vitesse locale à l'aide d'une fonction Level-Set	149
5.4.3.1	Description et implantation de la méthode	149
5.4.3.2	Validation de la méthode	151
5.5	Analyse du mélange au moment de l'allumage	151
5.5.1	Champs moyens	151
5.5.2	Champs instantanés	154
5.5.3	Structures turbulentes	154
5.6	Propagation de la flamme	156
5.6.1	Effets de la stratification	156
5.6.2	Champs instantanés	158
5.6.3	Contours moyens	159
5.6.4	Contour 3D	160

5.6.5	Analyse de la vitesse de flamme	162
5.6.6	Influence de la courbure	164
5.6.7	Dynamique dans les gaz brûlés	168
5.6.8	Etude de la flamme à l'aide des harmoniques sphériques	172
5.7	Conclusion	175
6	Extension de l'analyse par une dilution en EGR	177
6.1	Introduction	177
6.2	Présentation des simulations	178
6.2.1	Dilution en gaz brûlés	178
6.2.2	Conditions initiales	178
6.3	Propagation d'une flamme avec présence d'EGR	180
6.3.1	Cas homogènes	180
6.3.2	Forme du noyau des cas stratifiés par une dilution en EGR	181
6.3.3	Vitesse de flamme	182
6.4	Comparaison avec une stratification en gaz frais	184
6.4.1	Forme de la flamme	184
6.4.2	Diffusion des espèces et de la température	185
6.4.3	Vitesses de flamme	187
6.4.4	Dynamique dans les gaz brûlés	188
6.5	Flamme établie rencontrant des EGR	189
6.6	Conclusion	191
7	Conclusions et perspectives	193
7.1	Conclusions	193
7.2	Perspectives	195
A	Mécanisme Propane-Air semi-détaillé	205
B	Détails sur le code YALES2	211
B.1	Discrétisation spatiale	211
B.2	Choix des schémas numériques	211
B.3	Solveur à densité variable	212
C	Fonctionnement général d'un scheduler dynamique	215
C.1	Principe	215
C.2	Détails de la mise en oeuvre	216
C.3	Performances	217
D	Publications et conférences	221
D.1	Publications	221
D.2	Conférences	221
	Bibliographie	222

Listes des symboles et acronymes

Acronymes

BDF	Backward differentiation formula
CAI	Controlled Auto Ignition
DISI	Direct Injection Spark Ignition Engines
DNS	Direct Numerical Simulation
DRG	Direct Related Graph
DRGEP	Direct Related Graph with Error Propagation
EDP	Equations aux dérivées partielles
EGR	Exhaust Gas Recirculation
F-TACLES	Filtered Tabulated Chemistry for Large Eddy Simulation
FGM	Flamelet Generated Manifold
FPI	Flame Prolongation of ILDM
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
IGR	Internal Gas Recirculation
ILDM	Intrinsic Low Dimensional Manifold
ISAT	In situ adaptive tabulation
LES	Large Eddy Simulation
LMN	Low Mach Number
ODE	Equation différentielle ordinaire
PCM	Presumed Conditional Moments
PDF	Probability Density Function
PEA	Partial Equilibrium Approximation
QSSA	Quasi Steady State Approximation
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
TFV4A	Two-step Finite-Volume 4th-order scheme version A
VDS	Variable Density Solver

VVT Variable Valve Timing

YALES2 Yet Another LES Solver

Lettres grecques

δ_{ij}	Tenseur de Kronecker
$\dot{\omega}_k$	Terme source de l'espèce k ($\text{m}^3.\text{kg}^{-1}.\text{s}^{-1}$)
$\dot{\omega}_T$	Terme source de la température ($\text{J}.\text{m}^3.\text{kg}^{-1}.\text{s}^{-1}$)
η_k	Echelle de Kolmogorov (m)
λ	Coefficient de conductivité thermique ($\text{W}.\text{m}^{-1}.\text{K}^{-1}$)
μ	Coefficient de viscosité dynamique ($\text{kg}.\text{m}^{-1}.\text{s}^{-1}$)
ν	Coefficient stoechiométrique molaire
ϕ	Richesse globale
ρ	Masse volumique ($\text{kg}.\text{m}^{-3}$)
τ_{ij}	Tenseur des contraintes de sous-maille
φ	Richesse locale

Indices

0	Relatif à la pression de référence
BG	Gaz brûlés
F	Relatif au carburant (fuel)
f	Relatif au côté rapide (fast)
FG	Gaz frais
k	Relatif à l'espèce k
$lean$	Relatif au côté pauvre
O	Relatif à l'oxydant
$rich$	Relatif au côté riche
s	Relatif au côté lent (slow)

Lettres romaines

\dot{Q}	Terme source volumique ($\text{J}.\text{m}^3.\text{kg}^{-1}.\text{s}^{-1}$)
\mathbf{n}	Vecteur normal
\mathcal{N}_A	Constante d'Avogadro (mol^{-1})
\mathbf{m}	Masse (kg)
C	Variable de progrès adimensionnée
c	Vitesse du son ($\text{m}.\text{s}^{-1}$)
C_k	Concentration de l'espèce k ($\text{mol}.\text{m}^{-3}$)
c_p	Capacité calorifique massique à pression constante ($\text{J}.\text{K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$)

C_S	Constante du modèle de Smagorinsky
c_v	Capacité calorifique massique à volume constant ($\text{J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$)
D_{kj}	Diffusivité de l'espèce k dans l'espèce j ($\text{m}^2.\text{s}^{-1}$)
H_k^m	Enthalpie molaire standard
h_s	Enthalpie sensible (J.kg^{-1})
k_B	Constante de Boltzmann (J.K^{-1})
L	Echelle de longueur caractéristique (m)
l_t	Echelle intégrale (m)
N_{spe}	Nombre d'espèces présentes dans le mécanisme
P	Pression (Pa)
R	Constante molaire des gaz parfaits ($\text{J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$)
r	Constante thermodynamique d'un gaz ($\text{J.K}^{-1}.\text{kg}^{-1}$)
s_a	Vitesse absolue de la flamme (m.s^{-1})
S_C	Facteur de ségrégation
s_d	Vitesse de déplacement de la flamme (m.s^{-1})
S_k^m	Entropie molaire standard
s_L	Vitesse laminaire de la flamme (m.s^{-1})
T	Température (K)
t	Temps (s)
u_i	Vitesse suivant la direction i (m.s^{-1})
$V_{k,i}$	Vitesse de diffusion de l'espèce k suivant la direction i (m.s^{-1})
W	Masse molaire du mélange (kg.mol^{-1})
X_k	Fraction molaire de l'espèce k
Y_C	Variable de progrès
Y_k	Fraction massique de l'espèce k
Z	Fraction de mélange

Nombres sans dimension

Le	Nombre de Lewis
M	Nombre de Mach
Re	Nombre de Reynolds
Sc	Nombre de Schmidt

Sommaire

1.1	Introduction	17
1.2	Fonctionnement général du moteur à combustion interne	18
1.3	Impact sur l'environnement et normes en vigueur	19
1.4	Post-traitement des polluants	20
1.5	Nouvelles technologies moteur	21
1.5.1	Le moteur HCCI	21
1.5.2	Le moteur à injection directe, modes mixtes	22
1.5.3	La vanne EGR	23
1.5.4	La distribution variable	24
1.6	Objectifs et plan de la thèse	25

1.1 Introduction

La combustion est un phénomène complexe au cœur de nombreuses recherches et présent dans de nombreuses applications industrielles. Il s'agit en effet d'un moyen couramment utilisé pour transformer de l'énergie. Dans la société actuelle, trois grands secteurs emploient la combustion dans ce but :

Le secteur industriel : ce secteur est un grand consommateur d'énergie. De nombreuses usines nécessitent à la fois de l'électricité et de la chaleur pour leur fonctionnement. Ceci est d'autant plus vrai pour les usines de métallurgie, de transformation ou de production de verre, papier ou de ciment mais aussi pour les usines de traitement de déchets.

Le secteur de l'énergie : la combustion est ici utilisée dans le but de créer de l'énergie thermique ou de l'électricité. Dans de nombreux pays, l'électricité est générée à partir d'installations de type centrale thermique ou turbine à gaz. La demande croissante en électricité entraîne un essor du nombre de ces centrales et par conséquent des émissions de CO_2 . Il existe pourtant d'autres moyens de produire de l'électricité, tels que la filière nucléaire ou les énergies renouvelables mais ceux-ci représentent une part mineure de la production d'électricité actuelle.

Le secteur des transports : la combustion est le point central du développement du secteur des transports, que ce soit au niveau terrestre, maritime ou aérien. Grâce à elle, l'automobile est devenue le moyen de transport quotidien de millions de personnes.

Cette thèse CIFRE est le résultat d'une collaboration entre Renault et le laboratoire de recherche CNRS CORIA, UMR 6614. Le sujet de cette thèse consiste en l'étude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration. Plus particulièrement, le but est de comprendre le rôle de la stratification ou de la dilution d'un mélange par des gaz recirculants.

Ce chapitre est organisé comme suit. Premièrement, le fonctionnement général d'un moteur à combustion interne est présenté. Nous verrons que celui-ci est source d'émissions polluantes.

De ce fait, les normes concernant ces émissions sont rappelées dans un second temps. Les nouvelles technologies développées pour respecter ces normes sont ensuite répertoriées. Pour finir, la problématique et le plan de la thèse sont abordés.

1.2 Fonctionnement général du moteur à combustion interne

Le but de ce moteur est de convertir de l'énergie chimique en travail mécanique. Le carburant est en général de l'essence ou du diesel, les deux étant des mélanges d'hydrocarbures.

Dans l'industrie automobile, deux types de moteurs à combustion interne se distinguent : les moteurs à allumage par compression, utilisés généralement avec le gasoil, et les moteurs à allumage commandé, couramment utilisés pour l'essence. La démarcation entre ces deux moteurs se fait dans la façon d'injecter le carburant dans la chambre de combustion, dans le type d'allumage et de combustion. Dans le moteur à allumage par compression, le carburant est injecté dans un volume d'air déjà fortement comprimé. La pression dans la chambre de combustion est donc élevée, et provoque une augmentation de la température. Lorsque la température du mélange est suffisamment élevée, le carburant s'enflamme. Le fonctionnement du second type est un peu différent. L'allumage du mélange air-carburant est réalisé grâce à une étincelle électrique qui provoque l'inflammation par dépôt d'énergie localisé.

Actuellement, la plupart des automobiles sont dotées d'un moteur quatre temps soit deux tours complets de vilebrequin par cycle.

Pour le moteur à allumage commandé, ces temps font référence à l'admission, la compression, la détente et l'échappement. Ils sont schématisés sur la figure 1.1 et détaillés ci-dessous :

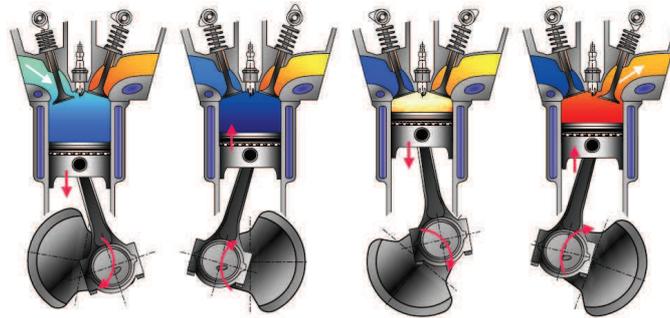


Fig 1.1 – Cycle à 4 temps d'un moteur à allumage commandé, extrait de [64].

1. durant la phase d'admission, la soupape d'échappement est fermée tandis que la soupape d'admission est ouverte. Le mélange air/carburant est introduit dans la chambre de combustion grâce à la dépression qu'entraîne le mouvement du piston en descendant du point mort haut au point mort bas ;
2. vient ensuite la phase de compression durant laquelle les deux soupapes sont en position fermée. Grâce au vilebrequin, le piston monte du point mort bas vers le point mort haut et comprime ainsi le mélange air/essence présent dans la chambre. La température du mélange augmente alors de 300 K environ ;
3. lorsque le piston atteint la position point mort haut, l'inflammation des gaz est provoquée par une étincelle qui est produite entre les électrodes de la bougie. Cette combustion entraîne une élévation brutale de la pression et la température. Le piston est poussé vers le point mort bas. Durant cette phase, nommée détente, les deux soupapes sont encore en position fermée ;

4. au moment où le piston arrive au point mort bas, la soupape d'échappement s'ouvre et permet aux gaz brûlés de s'échapper grâce à la remontée du piston.

Pour le moteur à allumage par compression, seul de l'air est introduit dans la chambre de combustion pendant la phase d'admission. Le carburant est introduit pendant la troisième étape. L'air étant chaud et comprimé, le mélange s'enflamme. Le fonctionnement décrit ici est le fonctionnement idéal. Dans la réalité, l'ouverture et fermeture des soupapes sont décalées. La combustion débute avant l'arrivée du piston au point mort haut. L'optimisation des différents paramètres permet d'augmenter la puissance délivrée par le moteur.

Pour le moteur à allumage commandé, deux injections sont possibles. L'injection peut se faire de manière directe, dans ce cas le carburant est directement introduit dans la chambre de combustion. Elle peut aussi être réalisée de manière indirecte, l'air et le carburant sont alors prémélangés avant d'entrer dans la chambre de combustion principale.

Bien que le fonctionnement des moteurs à allumage commandé repose sur un processus de combustion homogène proche de la stœchiométrie, ces derniers génèrent un certain nombre de polluants. En effet, la combustion repose sur un ensemble de réactions chimiques. Ces réactions sont en général exothermiques et constituent de manière globale une réaction d'oxydo-réduction. Cette dernière réaction peut s'écrire : $\nu_F F + \nu_O O \rightarrow \nu_P P$. Le combustible F et le comburant O se transforment en produits P . Ces produits peuvent être toxiques et qualifiés de polluants. Le monoxyde de carbone (CO) est produit lors de la dissociation du dioxyde de carbone à haute température. L'oxydation de ce dernier est de plus ralentie lors de la phase de détente. Des espèces oxydantes sont présentes tels que le monoxyde d'azote (NO). A la fin de la combustion, des hydrocarbures imbrûlés (HC) sont aussi présents dans la chambre, coincés dans les volumes morts de celle-ci.

La combustion se produisant dans les moteurs à compression est hétérogène. Le carburant et l'air ne sont pas parfaitement mélangés lorsque l'inflammation se produit. Cette hétérogénéité peut être recherchée dans certains modes de fonctionnement. Cependant, de nouveaux polluants viennent s'ajouter à la liste de ceux déjà présentés pour le moteur à allumage commandé, en particulier, les particules carbonées solides. De plus, bien que le fonctionnement idéal repose sur une combustion stœchimérique, le moteur peut fonctionner en régime pauvre. Dans ce dernier cas, de l'oxygène est encore présent lors de la phase d'échappement.

Dans le contexte écologique actuel, et du fait du changement climatique, il apparaît comme essentiel de limiter ces émissions polluantes.

1.3 Impact sur l'environnement et normes en vigueur

Pour faire face au rejet de polluants par les moteurs thermiques, des normes européennes limitant ces émissions ont vu le jour dans le but de contrôler la pollution atmosphérique due au transport. Celles-ci fixent les limites maximales de rejets polluants pour les nouveaux types (NT) de véhicules ainsi que pour tous les véhicules neufs roulants (TT : tout type). Au cours du temps, ces normes deviennent de plus en plus drastiques comme le montre le tableau 1.1.

Les deux premières normes Euro 1 et Euro 2, entrées respectivement en vigueur en 1992 et 1996, se sont concentrées sur la réduction du monoxyde de carbone (CO) et des hydrocarbures imbrûlés méthaniques (HC). Ensuite, les normes se sont resserrées pour les émissions de monoxyde d'azote (NO_x) et pour les particules. Pour les moteurs essence, une surveillance des normes des hydrocarbures non méthaniques ($HCNM$) apparaît à partir de la norme Euro 5.

On notera ici que le dioxyde de carbone n'entre pas dans ces normes. En effet, il ne s'agit pas d'un polluant mais les émissions de CO_2 sont aussi surveillées par l'Union Européenne.

Normes	Année		CO	HC	HCNM	HC+ NO _x	NO _x	Masse de Particules	Nombre de Particules
	NT	TT							
Diesel									
Euro 1	1992		2.720	-		0.970	-	0.140	
Euro 2 IDI	1996		1.000	-		0.700	-	0.080	
Euro 2 DI	1999		1.000	-		0.900	-	0.100	
Euro 3	01/2000	01/2001		0.640	-	0.560	0.500	0.050	
Euro 4	01/2005	01/2006		0.500	-	0.300	0.250	0.025	
Euro 5	09/2009	01/2011		0.500	-	0.230	0.180	0.005	6×10^{11}
Euro 6	09/2014	09/2015	0.500	-		0.170	0.080	0.005	6×10^{11}
Essence									
Euro 1	1992		2.720	-		0.970	-	-	
Euro 2	1996		2.200	-		0.500	-	-	
Euro 3	01/2000	01/2001	2.300	0.200		-	0.150	-	
Euro 4	01/2005	01/2006	1.000	0.100		-	0.150	-	
Euro 5	09/2009	01/2011	1.000	0.100	0.068	-	0.060	0.005a	
Euro 6	09/2014	09/2015	1.000	0.100	0.068	-	0.060	0.005a	6×10^{12}

a : pour moteur à injection directe essence, mélange pauvre seulement.

Tableau 1.1 – Limites d'émissions UE pour les véhicules particuliers - en g/km, source : ADEME.

Un autre point important à noter ici est la limitation des ressources pétrolières. Jusqu'à présent, l'offre pétrolière avait su s'adapter à la consommation. Chaque année, de nouveaux gisements sont découverts et exploités. Cependant, la demande est toujours croissante et le nombre de gisements est limité. L'accès aux ressources devient de plus en plus complexe et coûteux. Il existe donc un moment inéluctable où la demande ne pourra plus être satisfaite. Ce moment est appelé "pic pétrolier". Les producteurs de pétrole sont les plus optimistes, ils espèrent que le pic pétrolier sera atteint en 2020 ou 2030.

Quelqu'en soit la date réelle, ce dernier point montre l'intérêt de réduire la consommation de carburant ou d'utiliser des énergies alternatives. Cependant, les énergies alternatives ne seront pas abordées dans cette thèse.

Les technologies permettant de post-traiter les polluants afin de respecter ces normes sont présentées brièvement. Dans un second temps, les avancées réalisées quant à la réduction de consommation de carburant sont abordées.

1.4 Post-traitement des polluants

Le traitement des polluants ne fait pas partie de cette thèse. Il paraît tout de même important de rappeler les efforts effectués dans cette direction. Par conséquent, une brève revue des concepts de dépollution est fournie dans cette section. Pour plus de détails concernant ces techniques, le lecteur est prié de se référer à la bibliographie [168, 169].

Catalyseur d'oxydation Diesel : les catalyseurs d'oxydation ont fait leur apparition dans les années 1970. Ils ont pour vocation principale l'oxydation des hydrocarbures imbrûlés et du monoxyde de carbone. Cette oxydation se fait à l'aide de métaux précieux tels que le platine et

le palladium.

Filtre à particules : les particules ont un impact fort sur la santé. Nous avons vu dans le tableau 1.1 que les particules n'apparaissent que dans les moteurs diesel, par conséquent, le filtre à particule est spécifique à ce type de moteur. Celles-ci sont formées dans la chambre de combustion, dans les zones riches en carburant. Il est possible de séparer les particules solides du flux gazeux, et ceci de deux façons : soit, par impact sur les parois d'un système ouvert, soit par filtration à travers une paroi poreuse. Cette deuxième méthode s'avère bien plus efficace car elle permet d'atteindre des performances de filtration supérieures à 90% tandis que la première aura une efficacité inférieure à 60%. Seul le second type de filtre est retenu. Ce filtre doit être régulièrement régénéré en brûlant les particules à une température particulièrement élevée, typiquement supérieure à 800 K.

Post-traitement NO_x : le dernier type de post-traitement des polluants pour les moteurs diesel concerne les oxydes d'azote. Quatre technologies majeures servent à la réduction des NO_x :

1. la décomposition catalytique du NO ,
2. la réduction sélective des NO_x en présence d'hydrocarbures,
3. le stockage des NO_x ,
4. la réduction sélective des NO_x par l'urée.

La première solution a été abandonnée pour des problèmes de stabilité thermique. La seconde technologie n'a pas non plus été choisie à cause de sa faible performance et d'une plage de fonctionnement trop limitée. Certains constructeurs évoquent la possibilité de combiner les deux dernières technologies sur une même ligne d'échappement [37, 180, 204].

Catalyse 3 voies : cette technologie est la technologie adoptée pour les moteurs essence. A l'origine, les technologies de dépollution essence avaient pour but de diminuer les émissions de monoxyde de carbone ainsi que celles d'hydrocarbures imbrûlés [102]. Cependant, les réglementations présentées dans la section 1.1 impliquent aussi une réduction des émissions d'oxyde d'azote. Les réactions d'oxydation de CO et HC et les réactions de réduction des oxydes d'azote NO_x doivent être contrôlées simultanément. Ces équilibres constituent la fonction principale du catalyseur 3 voies. Cette technologie ne peut être adaptée aux moteurs diesel car elle requiert un gaz d'échappement riche en hydrocarbures et contenant peu d'oxygène.

1.5 Nouvelles technologies moteur

Une autre possibilité pour réduire les émissions polluantes est d'effectuer des modifications au niveau des technologies moteur. De plus, la réduction de la consommation de carburant représente un axe majeur dans la recherche automobile. Au cours de ces dernières années, plusieurs technologies ont vu le jour pour répondre à ces deux axes de recherche.

Les mécanismes utilisés pour ces nouveaux moteurs reposent sur la réduction des pertes par frottement et par pompage, la combustion en mélange pauvre, la recirculation des gaz brûlés, l'injection directe, les mélanges hétérogènes et homogènes ainsi que l'auto-inflammation.

1.5.1 Le moteur HCCI

Le moteur Homogeneous Charge Compression Ignition est un mode de fonctionnement pour le gasoil [125, 174]. Dans un premier temps, le mélange air/carburant est rendu le plus homogène possible, comme dans un moteur essence. Il rentre durant la phase d'admission et est comprimé jusqu'à l'auto-allumage comme dans un moteur diesel habituel. Ce nouveau moteur combine donc

les deux spécificités des moteurs décrits jusqu'à présent. A cause du fort taux de compression, un allumage spontané de l'ensemble du mélange se produit.

Ce type de combustion reste difficile à contrôler. Le début de la combustion ainsi que le taux de dégagement de chaleur sont deux paramètres clés à maîtriser. Pour l'instant, le domaine de stabilité d'un tel moteur est très réduit. Il fonctionne de manière satisfaisante dans les domaines de faibles et moyennes charges mais des difficultés apparaissent pour des charges plus élevées. Ces dernières sont plus difficiles à contrôler et peuvent amener des bruits intenses¹ et donc une dégradation du moteur.

Afin de mieux maîtriser le phénomène d'auto-allumage, il est fréquent que des gaz d'échappement froids ou chauds soient réinjectés dans la chambre de combustion avec le mélange air/carburant. Ceux-ci ont trois objectifs. Premièrement, ils permettent de diluer le mélange air/carburant et de retarder l'auto-inflammation. Secondement, ils apportent une température plus élevée au mélange, favorable à son auto-inflammation. Pour finir, ils permettent de faire varier la capacité calorifique du mélange.

Lorsque le carburant utilisé est de l'essence, le moteur prend le nom de Controlled Auto Ignition (CAI).

1.5.2 Le moteur à injection directe, modes mixtes

Contrairement au principe de fonctionnement du moteur essence présenté dans la section 1.2, l'injection du carburant est ici réalisée de manière directe. L'injecteur de carburant est placé directement dans la chambre de combustion.

Le moteur essence à injection directe possède deux types de fonctionnement. Soit il opère en mode homogène, soit il fonctionne en modes mixtes. Le fonctionnement en modes mixtes signifie

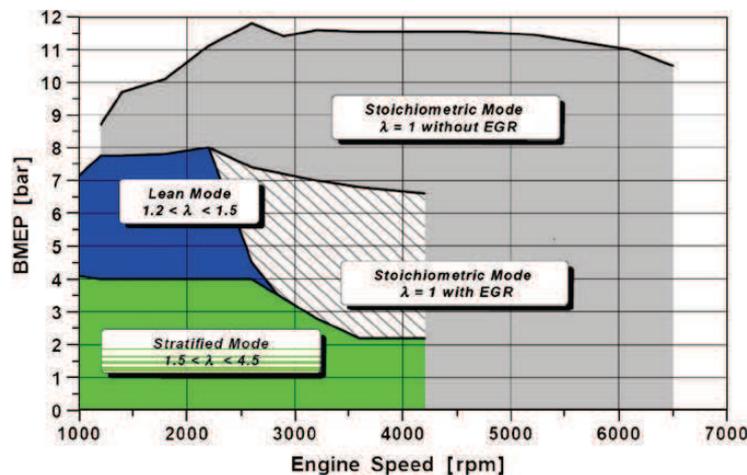


Fig 1.2 – Modes opérationnels d'un moteur à charge stratifiée, extrait de [167].

que le mélange est composé de deux parties, une petite partie riche et une grande partie pauvre. Le moteur est dit à charge stratifiée. Ce mode de fonctionnement s'établit dans le régime faible charge et faible vitesse. La richesse est alors globalement pauvre. Ce régime stratifié diminue les pertes par pompage et permet des économies notables de carburant. Pour des charges et des

1. Combustion non désirée qui produit des résonances.

vitesse plus importantes, la combustion s'établit de nouveau en mélange homogène. Un exemple des modes de fonctionnement d'un tel moteur est représenté sur la figure 1.2, en fonction de la pression effective moyenne (Brake Mean Effective Pressure (BMEP)) et du régime moteur.

La subtilité du moteur réside dans la manière de réaliser l'injection. Dans le mode homogène, l'injection se fait simultanément avec l'injection d'air, durant la phase d'admission, ce qui permet une homogénéisation du mélange. Dans le mode stratifié, l'injection a lieu à la fin de la phase de compression. Le carburant vaporisé reste confiné à proximité de la bougie.

Trois technologies d'injection permettent une telle vaporisation [7]. Celles-ci sont représentées sur la figure 1.3.

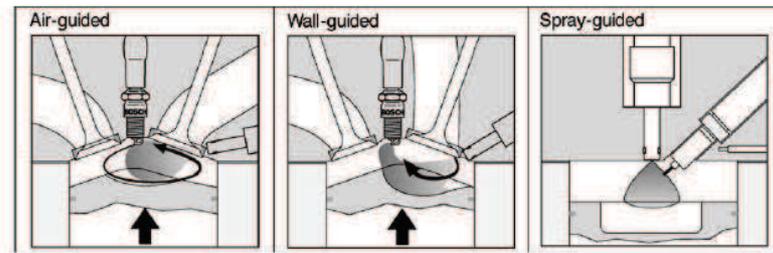


Fig 1.3 – Systèmes d'injection, extrait de [152].

Pour les injections guidées par l'air ou par les parois, l'injecteur est situé relativement loin de la bougie d'allumage. Le carburant se dirige vers la bougie grâce à un mouvement tourbillonnaire dans l'air ou grâce à la forme de la cavité du piston. Dans la dernière technologie, l'injecteur est situé au plus proche de la bougie de telle sorte qu'un couplage fort entre le carburant et l'allumage soit directement créé [170].

Le mélange s'allume alors dans une région globalement riche puis se propage à travers l'ensemble de la chambre de combustion qui contient un mélange pauvre.

Grâce à ce type de combustion, des gains de plus de 20% peuvent être effectués sur la consommation de carburant [188, 170].

1.5.3 La vanne EGR

Nous avons vu, dans la section 1.5.1, qu'afin de mieux maîtriser la combustion dans le moteur HCCI, il était fréquent que des gaz d'échappement soient réinjectés dans la chambre de combustion. La vanne EGR pour "Exhaust Gas Recirculation" constitue l'une des solutions possibles pour parvenir à ce but. Cette vanne permet de réduire les émissions de NO_x (oxydes d'azote). En effet, l'introduction de gaz d'échappement dans le cylindre ralentit la combustion. Une partie du mélange contenu dans le cylindre étant des gaz brûlés, la quantité d'air présente est réduite.

Son principe date des années 1970 et est montré sur la figure 1.4.

Une partie des gaz d'échappement est prélevée en sortie du moteur puis refroidie. Le débit de gaz réintroduit dans le circuit d'admission est contrôlé par la vanne EGR qui peut prendre toutes les positions, de la fermeture à l'ouverture complète. Les EGR sont alors mélangés à l'air avant d'être admis dans le cylindre.

La réintroduction de gaz d'échappement est aussi étudiée pour réduire la production de particules [78, 112]. Cependant, en fonction du régime de fonctionnement, l'injection de gaz brûlés peut entraîner une surproduction de celles-ci. Un compromis doit être trouvé entre la quantité d'EGR injectée et le nombre de particules formées.

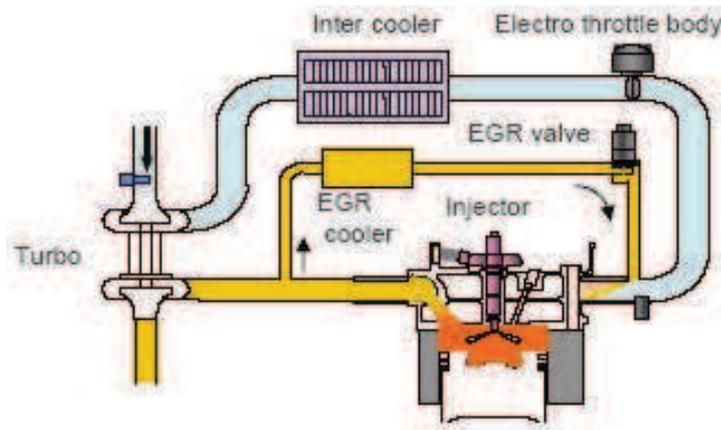


Fig 1.4 – Principe de fonctionnement de la vanne EGR.

1.5.4 La distribution variable

Parmi les nouvelles technologies du moteur à injection directe, il est important de noter les systèmes à distribution variable, "Variable Valve Timing" (VVT). La thèse de T. Leroy [106] fournit une description complète de son fonctionnement.

L'ouverture et la fermeture des soupapes sont gérées de manière à optimiser le mélange entrant dans les cylindres ainsi que l'évacuation des gaz d'échappement.

Un exemple typique de VVT est le déphaseur d'arbre à cames. Ce dernier modifie la position d'ouverture et de fermeture des soupapes par rapport à la position angulaire du vilebrequin. De ce fait, les soupapes peuvent être ouvertes simultanément, ce qui permet la recirculation de gaz internes chauds (IGR), comme illustré sur la figure 1.5. Une autre partie de cette recirculation interne est due aux gaz restés coincés dans les volumes morts et qui de ce fait, n'ont pas eu la possibilité d'être évacués.

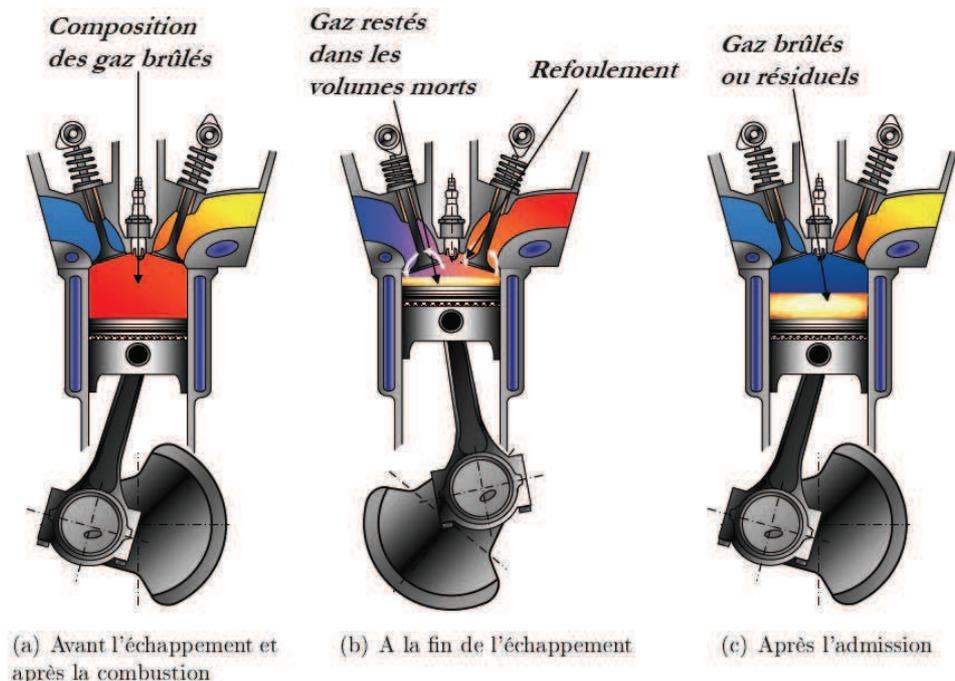


Fig 1.5 – Formation de la recirculation interne de gaz, extrait de [43].

Ce mécanisme présente plusieurs avantages. Tout d'abord, l'augmentation de la pression, nécessaire pour garder une masse d'air constante, limite les pertes par pompage. Ensuite, les gaz brûlés présents dans la chambre de combustion possèdent une température élevée. Cependant, la propagation de la flamme est ralentie par les molécules d'eau et de CO_2 , présentes dans les IGR. La masse de gaz brûlés agit comme un ballast thermique et modifie alors les équilibres chimiques. La température finale est abaissée. Ce dernier point est important puisqu'il implique une réduction de formation et d'émission de NO_x .

La quantité de gaz brûlés doit être contrôlée afin d'assurer la stabilité de la combustion. En effet, lorsque la masse de gaz brûlés devient trop importante par rapport à la masse d'air ($> 40\%$) le moteur a de forts risques d'avoir un comportement instable. Les rendements de combustion sont affaiblis.

1.6 Objectifs et plan de la thèse

Ce premier chapitre a montré la diversité des modes de combustion pouvant se produire au sein d'un moteur automobile. Rares sont les fois où la combustion se produit dans un milieu totalement homogène. Il a été vu de plus, que toutes les nouvelles technologies devaient être contrôlées, en terme de quantité de gaz brûlés.

De ce fait, le principal but de cette thèse est d'étudier le comportement d'un front de flamme établi dans un domaine hétérogène. Cette hétérogénéité peut concerner la richesse, la composition (dilution par des gaz brûlés) ou encore la température.

Pour cela, des simulations numériques sont effectuées. En effet, les puissances de calcul ne cessent d'augmenter et permettent maintenant la réalisation de calculs détaillés de domaines conséquents.

Le contexte industriel de cette étude a été présenté dans le premier chapitre. Il faut tout de même noter que la combustion stratifiée ne se trouve pas exclusivement dans les moteurs automobiles mais dans de nombreuses applications. De ce fait, le second chapitre est consacré à un état de l'art des études réalisées sur ce sujet.

Cette thèse étant menée à l'aide de simulations numériques, le troisième chapitre est dédié à la présentation des outils de modélisation et d'analyses. Dans ce chapitre, une description de la cinétique chimique est également réalisée. Deux modélisations de la chimie sont en effet utilisées pour effectuer les simulations numériques de cette thèse.

Les études accomplies et les résultats obtenus sont présentés dans les chapitres 4 et 5. Le chapitre 4 porte plus particulièrement sur l'expansion d'un noyau de flamme laminaire. Le but est ici de comprendre les fondements des effets de la combustion stratifiée. Un mouvement au sein des gaz brûlés est ainsi mis en évidence et un modèle servant à la prédiction de la vitesse dans les gaz brûlés est proposé. Le chapitre 5, quant à lui, présente une étude d'un noyau en expansion dans un mélange turbulent. Cette étude a déjà été réalisée de manière expérimentale par S. Balusamy lors de ses travaux de thèse [11]. Il s'agit d'une application se rapprochant d'un comportement moteur à charge stratifiée puisque l'étude est réalisée dans un système fermé et présente une injection de mélange riche au sein d'un mélange pauvre.

L'extension de l'analyse à une stratification en gaz brûlés est abordée dans le sixième chapitre. La température des gaz brûlés est ici maintenue à la température des gaz frais et la configuration du chapitre 4 est reprise afin de différencier les effets d'une stratification par une dilution en gaz brûlés de ceux d'une stratification par un mélange plus pauvre.

Un dernier chapitre tient lieu de conclusion générale et annonce les travaux futurs réalisables sur ce sujet.

Chapitre 2

Revue des analyses de flammes en propagation dans un milieu stratifié

Sommaire

2.1	Introduction	27
2.2	Classification de la stratification et structure générale de la flamme	29
2.3	Influence de la stratification sur la topologie de la flamme	30
2.3.1	Epaisseur de la flamme	30
2.3.2	Plissements et densité de surface de flamme, réaction à la courbure	31
2.4	Distribution de mélange et évolution des espèces	33
2.4.1	Effet de la distribution de mélange sur la production de NO_x	33
2.4.2	Diffusion différentielle, évolution des espèces	35
2.5	Vitesses de flamme et limites d'inflammabilité	36
2.5.1	Etudes expérimentales	36
2.5.2	Etudes numériques	38
2.6	Flammes stratifiées à contre-courant	39
2.7	Résumé sur la stratification	41
2.8	Prise en compte des gaz brûlés	41
2.8.1	Modifications des caractéristiques de la combustion par les EGR	41
2.8.2	Impact de la composition des EGR sur la combustion	42
2.8.3	Stratification gaz frais/EGR	43
2.8.4	Effets des hétérogénéités des résidus de gaz brûlés.	45
2.9	Conclusion	46

2.1 Introduction

Ce chapitre a pour objectif de réaliser un état de l'art sur les recherches effectuées sur la combustion stratifiée. Les principaux axes de recherche y seront présentés. Cependant, il est nécessaire de rappeler les bases de la combustion avant de se plonger dans le monde de la stratification.

La combustion est un phénomène complexe se traduisant par un ensemble de réactions chimiques exothermiques d'oxydo-réduction. De telles réactions ne peuvent se produire qu'en présence d'une énergie initiale suffisante, nommée énergie d'activation. La flamme est la résultante de cette combustion; elle se caractérise généralement par une lumière vive. Deux types de flammes se distinguent : la flamme de prémélange et la flamme de diffusion. Ces deux flammes sont des flammes canoniques dont la différence repose sur la rencontre du mélange combustible/comburant. Dans le cas de la flamme de prémélange, la combustion a lieu dans un mélange déjà formé (à l'échelle microscopique) de carburant et comburant. La flamme, très fine dans les conditions usuelles, peut être considérée comme une interface entre les gaz frais et les gaz brûlés. Au contraire, dans le cas de la flamme de diffusion, le carburant et le comburant sont injectés

séparément et la combustion se produit à la rencontre des deux réactifs. La flamme de diffusion est aussi couramment appelée "flamme non prémélangée".

Ces deux flammes sont des cas canoniques dans le sens où elles correspondent à des situations idéalisées. Les flammes se produisant dans des applications industrielles telles que des turbines à gaz ou lors d'une "combustion naturelle" telle qu'un feu de forêt impliquent les deux types de flamme simultanément. Elles sont alors qualifiées de flammes triples, partiellement prémélangées ou de stratifiées.

La flamme triple doit son nom à sa structure spatiale particulière. Elle est en effet composée de deux flammes prémélangées, une riche et une pauvre, suivies d'une flamme de diffusion. Une telle flamme est représentée sur la figure 2.1. Ce type de flamme peut se produire lorsque des gaz

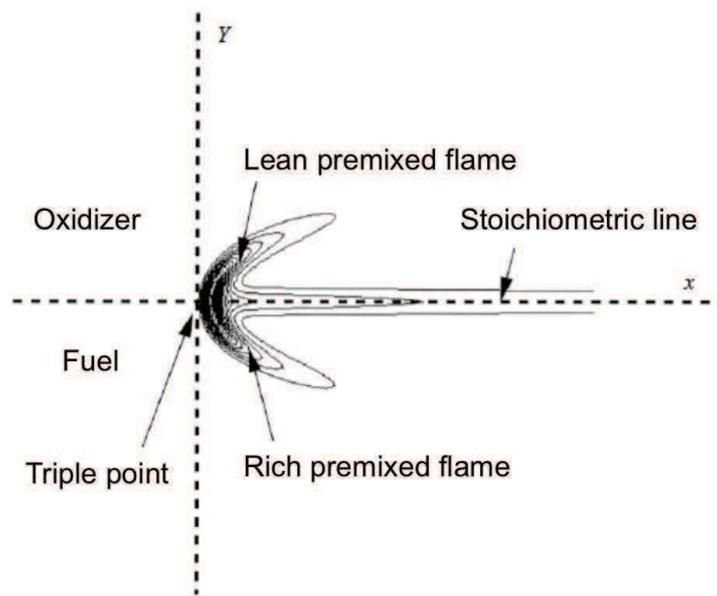


Fig 2.1 – Schématisation d'une flamme triple, extrait de [165].

chauds sont convectés vers un endroit de l'écoulement où un mélange combustible/comburant est en train de se produire. Les différentes études portant sur ce type de flamme ont montré qu'elle était contrôlée par l'intensité du dégagement de chaleur ainsi que par la courbure du front partiellement prémélangé.

Concernant la notion de "combustion stratifiée", sa signification est dépendante du contexte ou de la communautés concernée.

Pour les motoristes, le mot "stratifié" est rattaché à la combustion se produisant dans le moteur à injection directe présenté dans la section 1.5.2. Dans un tel moteur, la stratification provient de la présence de deux mélanges de richesses fortement distinctes au sein de la chambre de combustion. Le mélange riche est situé uniquement près de la bougie d'allumage et le reste du domaine est rempli d'un mélange pauvre. Lorsque la chambre de combustion est composée de mélange de composition et température variables, ce qui est le cas en présence d'EGR et d'IQR, les motoristes utilisent la notion de "combustion hétérogène".

Bilger *et al.* [17] apportent une autre définition de la flamme stratifiée dans ses paradigmes sur la recherche en combustion turbulente. La flamme est qualifiée de stratifiée lorsqu'elle évolue dans un milieu hétérogène entièrement pauvre ou riche, sans apparition de mélange stœchiométrique. Le terme "prémélangé/non prémélangé" est employé si le mélange stœchiométrique existe au sein du domaine.

Dans la suite de ce manuscrit, les notions d'hétérogène et de stratifié seront utilisées indifféremment pour décrire tout milieu où la composition et/ou la température du mélange ne sont pas homogènes et quelle que soit la richesse du mélange rencontré.

Les flammes stratifiées ont une structure plus complexe que les flammes de prémélange ou les flammes de diffusion. A l'heure actuelle, la propagation d'une flamme dans un milieu stratifié n'est pas encore complètement comprise et maîtrisée. Les recherches effectuées sur ces flammes sont moins avancées que celles des flammes prémélangées et celles des flammes de diffusion. La réalisation d'études expérimentales sur de telles flammes est un réel challenge. La confection d'un mélange stratifié s'avère extrêmement difficile si l'on souhaite que la stratification soit contrôlée. De nombreuses configurations ont été proposées pour la réalisation de tels mélanges. Elles passent par des bulles de mélange de richesse différente [69], des configurations avec ruptures de diaphragme [84], ou encore la propagation de flamme dans des conduits longs [10]. Le nombre d'études sur la combustion stratifiée en milieu laminaire est très restreint. D'un point de vue numérique, des modèles ont été présentés et appliqués à la combustion stratifiée [9, 51, 101, 127].

Des études apportant des résultats intéressants et permettant de généraliser quelques caractéristiques des flammes en milieu stratifié ont été effectuées. Un état de l'art sur les flammes partiellement prémélangées, relatif aux études réalisées dans cette thèse, est proposé ci-après.

2.2 Classification de la stratification et structure générale de la flamme

La stratification d'un mélange peut se diviser en trois grands types :

1. Pauvre à pauvre,
2. Riche à riche,
3. Riche à pauvre ou pauvre à riche.

Les deux premiers types de mélange correspondent à la définition de la stratification proposée par Bilger [16]. Les classes 1 et 3 s'avèrent être les plus étudiées puisqu'elles apparaissent dans les moteurs à injection directe ou les brûleurs swirlés.

De plus, la stratification peut s'effectuer à deux niveaux. Le premier consiste en une stratification à grande échelle. Dans ce cas, la flamme se propage à travers un faible gradient de stratification. D'autres mélanges ne contiennent des stratifications qu'à petite échelle (sous-maille), telles que des poches de gaz riche ou pauvre. Il est clair que ces deux familles de stratification peuvent coexister dans des applications réelles [79].

Une topologie particulière a été trouvée pour les stratifications de classe 3. Hélie et Trouvé [79] proposent une simulation numérique directe, avec une chimie globale et un nombre de Lewis unitaire. Grâce à cette simulation, ils montrent que la combustion dans un tel milieu s'accomplit en deux étapes. Pour commencer, une flamme de prémélange se propage suivie d'une seconde étape durant laquelle plusieurs flammes de diffusion brûlent les excès de fuel et d'oxygène, comme illustré sur la figure 2.2.

Le but de cette étude était de comprendre les effets d'un mélange partiellement prémélangé sur la topologie d'une flamme turbulente ainsi que sur son taux de réaction. Ils montrent que le prémélange partiel a un impact négatif sur le taux de réaction moyen, menant à des réductions jusqu'à 20% de ce dernier.

Cette topologie de flamme a aussi été étudiée par Haworth *et al.* [77]. Leurs simulations 2D sont réalisées avec un modèle de chimie détaillée ainsi qu'avec la prise en compte du transport

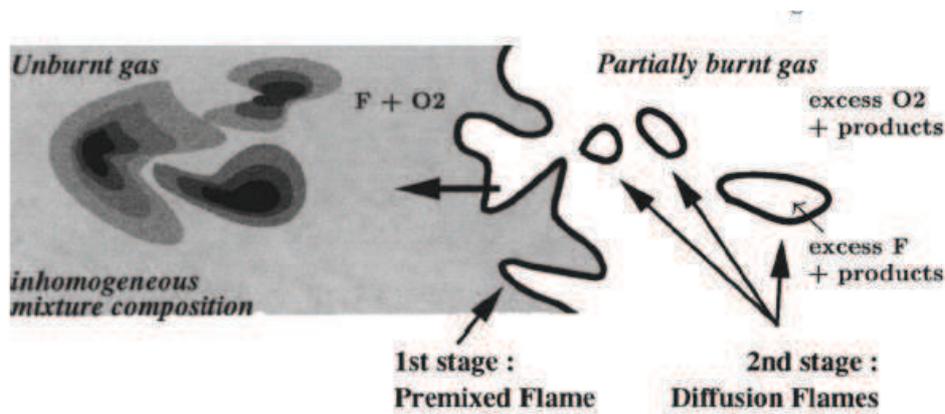


Fig 2.2 – Représentation de la propagation d’une flamme turbulente dans un milieu hétérogène, tiré de [80].

moléculaire. De même, l’hydrodynamique est pleinement résolue dans le sens où aucun modèle de turbulence n’est utilisé. Les conditions initiales de la simulation sont basées sur des conditions d’un moteur à injection directe fonctionnant à faible vitesse et en charge partielle. La topologie définie par Hélie *et al.* est de nouveau retrouvée. Concernant le taux de réaction de chaleur, ils montrent que celui-ci est initialement légèrement plus fort que dans le cas homogène mais qu’il diminue pour se révéler finalement légèrement plus faible que dans le cas homogène.

De plus, il ressort de ces deux études que les hétérogénéités de mélange ont un impact négatif sur la vitesse de flamme turbulente dans des conditions proches de la stœchiométrie. Au contraire, un effet positif est observé sur la vitesse de flamme turbulente au niveau des limites d’inflammabilité¹.

Ces notions seront étudiées plus en détails dans la section 2.5.

2.3 Influence de la stratification sur la topologie de la flamme

La section précédente a montré la structure générale d’une flamme stratifiée. Le présent paragraphe montre l’influence de la stratification sur la structure interne de la flamme.

2.3.1 Epaisseur de la flamme

La topologie d’une flamme partiellement prémélangée a été étudiée en terme d’épaisseur de flamme et de taux d’étirement [46, 160].

Dans la première étude, réalisée par Degardin *et al.* [46], des mesures simultanées de température et de fractions massiques de carburant sont réalisées. La structure d’une flamme stratifiée laminaire en forme de V est analysée. Les auteurs parviennent à mesurer l’épaisseur de flamme pour différentes stratifications (allant d’un mélange plus riche vers un mélange plus pauvre) ainsi que celles des flammes homogènes. Leur résultat donne l’épaisseur de flamme en fonction de la fraction molaire maximale locale de CH_4 . Il est représenté sur la figure 2.3.

Les différentes stratifications présentées sur la figure 2.3 sont listées ci-dessous :

- S1.** Stratification de $\varphi = 1.2$ à $\varphi = 0.0$.
- S2.** Stratification de $\varphi = 1.1$ à $\varphi = 0.0$.
- S3.** Stratification de $\varphi = 1.0$ à $\varphi = 0.0$.

1. Dans l’air, à pression atmosphérique et à $T = 298$ K, les limites d’inflammabilité du propane sont $\varphi = 0.53$ côté pauvre et $\varphi = 2.5$ côté riche [54].

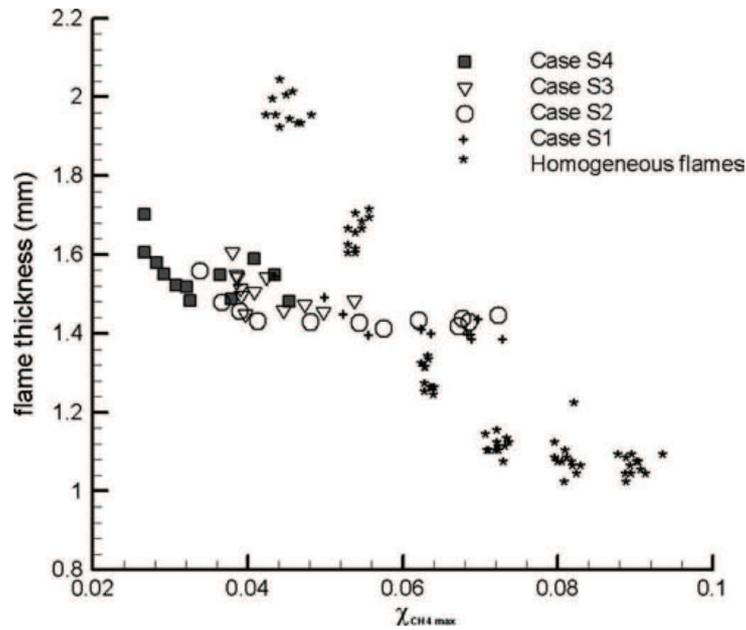


Fig 2.3 – Corrélation entre l'épaisseur de flamme locale et la fraction massique maximale de méthane. Différentes stratifications sont étudiées et comparées à des cas homogènes. A la stoechiométrie, $\chi_{CH_4} = 0.06$. Extrait de [46].

S4. Stratification de $\varphi = 0.9$ à $\varphi = 0.0$.

Dans des conditions homogènes, il est clairement visible que l'épaisseur de flamme augmente lorsque la fraction molaire de méthane diminue. Dans des conditions stratifiées, cette tendance est également apparente. Cependant la pente est beaucoup plus faible. L'épaisseur de flamme ne peut donc pas être directement corrélée avec la fraction locale de carburant. Des transferts de chaleur et de masse ont lieu au niveau de la flamme. Ceux-ci modifient son comportement.

Robin *et al.* [160] s'intéressent eux aussi à une flamme stratifiée en forme de V. Ils effectuent cela à la fois de manière expérimentale et de manière numérique. De plus, la flamme de la précédente étude [46] évoluait dans un milieu laminaire alors qu'ici l'étude se place dans un milieu turbulent. Pour les mesures expérimentales, les mêmes techniques que dans la précédente analyse sont utilisées, à savoir des mesures de température et de fraction molaire à l'aide de diffusion de Rayleigh et de fluorescence induite par laser. Leurs simulations sont réalisées à l'aide de modèles simplifiés [161]. Grâce à leur étude, ils arrivent à lier l'épaisseur de la flamme à son étirement pour des flammes homogènes. Ils montrent que dans ce cas, une interaction forte intervient entre ces deux caractéristiques. Ce phénomène n'est cependant pas visible pour des flammes stratifiées. En effet, pour ces dernières, les fluctuations de richesse interagissent avec le front de flamme local et ajoutent un étirement non négligeable. De ce fait, la flamme se trouve amincie d'environ 10%.

2.3.2 Plissements et densité de surface de flamme, réaction à la courbure

L'influence de la stratification sur la densité de surface de flamme ainsi que sur ses plissements a aussi été observée.

Garrido-Lopez *et al.* [62] s'intéressent dans leur étude à l'influence de la stratification à petite échelle sur les longueurs de flammes. Pour cela, ils réalisent des simulations numériques directes en deux dimensions, avec une chimie globale et une loi de Fick pour la diffusion. Ils définissent la longueur de flamme comme étant la longueur du front de flamme le long d'une ligne

d'iso-température. Différentes fluctuations de vitesses et de richesses sont introduites au sein du domaine. Ils remarquent que pour de faibles fluctuations de vitesse, typiquement inférieures à la vitesse laminaire de flamme, les longueurs de flammes se trouvent allongées en présence d'hétérogénéités de richesse. Plus ces hétérogénéités sont importantes, plus ce phénomène est conséquent. Lorsque les fluctuations de vitesse sont supérieures, ils notent également la présence d'un allongement de la longueur de flamme, cependant celui-ci est beaucoup plus faible.

La stratification à grande échelle est de nouveau étudiée sous forme de flamme en V turbulente par Anselmo-Filho *et al.* [8]. Deux jets de richesses différentes sont injectés côte à côte. La flamme est accrochée sur une baguette située légèrement à droite par rapport au centre du dispositif. Ce dispositif est schématisé sur la figure 2.4. L'asymétrie du dispositif permet à la

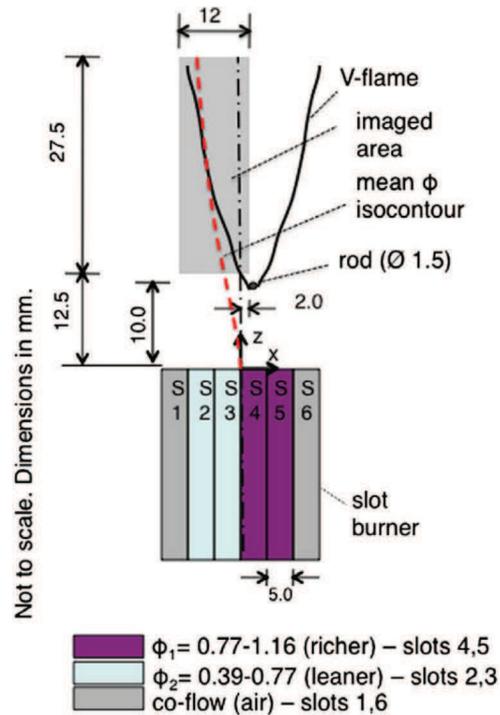


Fig 2.4 – Dispositif expérimental extrait de [8]. Schéma de la réalisation de la stratification.

branche gauche de la flamme de prendre en compte toute la stratification du mélange qui se développe entre les deux jets de réactifs. Plusieurs degrés de stratification sont analysés ainsi que des cas homogènes afin de pouvoir faire une comparaison. La densité de surface de flamme décrit la surface de flamme par unité de volume et peut permettre de bien caractériser la flamme pour des flammes épaisses. La surface de flamme est ici observée en fonction de la valeur de la variable de progrès. Cette dernière variable caractérise les zones de gaz frais et de gaz brûlés. Dans cette étude, la densité de surface de flamme des cas stratifiés est supérieure à celle des cas homogènes possédant la même richesse globale. La différence de propagation entre un mélange pauvre et un mélange riche entraîne la création d'une surface supplémentaire. Que la flamme soit homogène ou stratifiée, le maximum de la densité de surface de flamme est situé légèrement du côté des gaz brûlés. Ce décalage est d'autant plus visible dans les cas stratifiés. Dans les conditions étudiées, la densité de surface de flamme est maximale pour un ratio de stratification ϕ_1/ϕ_2 égal à 1.5. Ce cas correspond de plus à celui présentant une distribution de surface de flamme le plus symétrique. La courbure est aussi analysée dans cette étude. Il est ainsi vu que la distribution de courbure est plus large et plus symétrique pour des flammes stratifiées que pour des flammes homogènes. La stratification semble apporter une contribution supplémentaire en terme de courbure. D'après les auteurs, cette courbure n'est pas forcément liée aux déformations

induïtes par la stratification. Les effets de densité de surface de flamme et de courbure sont attribués à la différence de propagation entre un mélange riche et un mélange pauvre.

Le fait que la stratification apporte une contribution supplémentaire à la courbure et plus globalement à l'étirement avait déjà été mis en évidence par Poinso *et al.* [150]. Dans leur étude, plusieurs types de stratification sont analysées de manière numérique, en une, deux ou trois dimensions. Ils estiment la contribution du prémélange partiel à l'étirement par :

$$\kappa_{PP} \approx \frac{\Delta w}{l_Z}, \quad (2.1)$$

avec Δw les fluctuations de la vitesse de déplacement d'une iso-surface et l_Z la taille d'une poche de fluctuation de richesse.

Cette définition mène à un nombre de Karlovitz induit par le prémélange partiel :

$$K_a^{PP} \approx \frac{\Delta w}{l_Z} \frac{\delta_L^0(\langle Z \rangle)}{s_L(\langle Z \rangle)}, \quad (2.2)$$

où s_L est la vitesse laminaire de la flamme et δ_L^0 son épaisseur thermique. Les valeurs trouvées restent globalement faibles, typiquement inférieures à 0.2. Les flammes partiellement prémélangées produisent donc un étirement supplémentaire, positif, qui implique une combustion plus rapide que la flamme homogène équivalente, pour une flamme laminaire. Du fait des faibles valeurs du nombre de Karlovitz, l'effet produit par le prémélange partiel sera négligeable dans des flammes fortement turbulentes.

Récemment, le dispositif de flamme en V turbulente a été utilisé par Vena *et al.* [190]. Ces auteurs étudient plus particulièrement l'effet du degré de stratification sur la topologie de la flamme pour une combustion iso-octane/air. Ils concluent de leur étude que les gradients de richesse ont un effet conséquent sur les plissements de la flamme. L'effet étant d'autant plus important que le gradient est fort. Cependant, ils trouvent un effet bien plus modeste qu'Anselmo-Filho *et al.* [8] en ce qui concerne la densité de surface de flamme. En effet, leur flamme est épaissie par rapport à une flamme homogène, cependant, sa longueur est diminuée. Ces deux phénomènes s'équilibrent et n'apportent pas une grande modification à la densité de surface de flamme. Comme dans [8], la topologie de la flamme est aussi étudiée en terme de courbure. Cependant, les modifications du niveau de courbure apportées par la stratification sont négligeables dans cette étude. Les différences entre ces observations et celles de Anselmo-Filho *et al.* [8] sont attribuées à la différence de stratification, de méthodologie ainsi que de carburants utilisés.

Il est à remarquer que la structure interne d'une flamme stratifiée ainsi que sa topologie spécifique ne seront pas abordées directement dans les travaux de cette thèse. Seules les déformations globales dues à la stratification seront présentées et analysées.

2.4 Distribution de mélange et évolution des espèces

2.4.1 Effet de la distribution de mélange sur la production de NO_x

Jimenez *et al.* [87] effectuent une simulation numérique directe d'un mélange propane/air hétérogène, globalement pauvre. La résolution de la simulation impose une taille de domaine relativement petite. Le domaine de simulation se réduit à un cube dont les arêtes mesurent quelques millimètres. Les conditions initiales sont proches des conditions de fonctionnement d'un moteur à injection directe à faible vitesse et partiellement chargé. Il s'agit en effet du mode

stratifié permettant de réduire la consommation de carburant. Suite aux conclusions de Haworth *et al.* [77], le modèle de flammes [140]² est utilisé pour modéliser la combustion. Un des buts de l'étude [87] est de réaliser une modélisation de la combustion stratifiée. Un autre objectif est d'étudier les effets de la stratification sur la production de NO_x . Pour cela, N et NO sont ajoutés au mécanisme chimique permettant ainsi la réalisation du mécanisme de Zeldovich pour la production de NO thermique. Les configurations principalement étudiées sont représentées sur la figure 2.5.

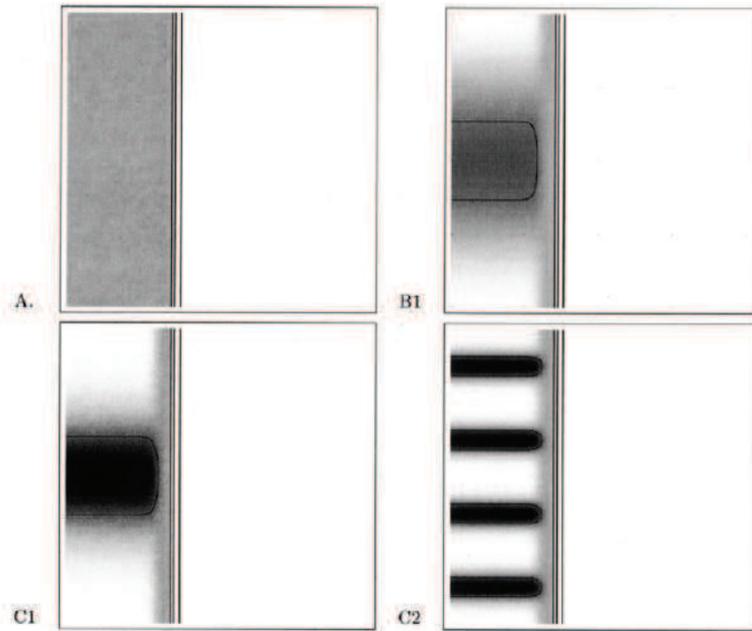


Fig 2.5 – Distribution spatiale de richesse initiale pour les différentes configurations étudiées, tiré de [87]. L'échelle va du blanc, correspondant à une richesse nulle, au noir, équivalent à une richesse égale à 2. La fine ligne noire représente la ligne stœchiométrique et les lignes verticales indiquent la position de la flamme laminaire initiale.

Deux aspects sont étudiés : le dégagement de chaleur et la production de NO_x .

Pour le premier, ils observent une grande différence entre le cas homogène et les cas stratifiés. Cette différence est principalement due à la distribution initiale de la fraction de mélange à petite ou grande échelle. En fonction de celle-ci, l'efficacité de la combustion peut être augmentée de 60%. Le cas le plus efficace est désigné par C1 sur la figure 2.5. La façon dont la stratification est réalisée constitue un point primordial pour le bon fonctionnement d'un moteur à charge stratifiée.

La fonction densité de probabilité de la fraction de mélange tout comme la distribution spatiale des hétérogénéités ont une grande influence sur la quantité de NO_x produits au cours de la combustion. Une flamme avec un haut taux de dégagement de chaleur peut en effet produire jusqu'à 40% de plus de NO_x qu'une flamme homogène. En effet, dans une combustion stratifiée globalement pauvre, il y a la présence simultanée de fortes températures et d'un haut taux d'oxygène qui favorise la production de NO .

2. L'hypothèse de flammlette est expliquée dans la section 3.7.

2.4.2 Diffusion différentielle, évolution des espèces

Un nouveau brûleur swirlé a été exploité récemment par Sweeney *et al.* [177, 178, 179]. Celui-ci est présenté sur la figure 2.6.

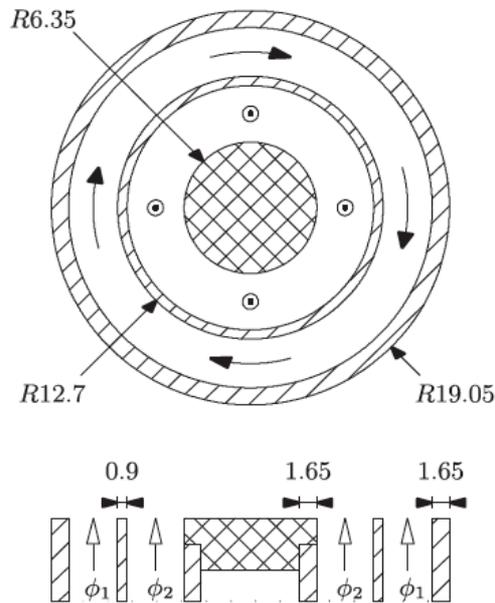


Fig 2.6 – Schéma du brûleur stratifié swirlé, tiré de [179].

Les études pratiquées avec celui-ci portent principalement sur la structure de flammes méthane/air stratifiées en richesse. Les conclusions déjà énoncées dans la section 2.3 sont retrouvées. La première étude est réalisée sans swirl, celui-ci est ajouté à partir de la seconde étude.

Un point intéressant de cette étude consiste en l'observation des espèces à travers la flamme. La diffusion différentielle est la cause de leurs évolutions. Les espèces sont en effet connues pour avoir une vitesse de diffusion caractéristique dépendante de la pression, de la température, de la composition locale et de leur masse molaire. Par conséquent, certaines espèces diffusent plus rapidement que d'autres. Chaque espèce k possède un nombre de Lewis, Le_k , qui lui est propre. Celui-ci correspond au rapport entre la diffusivité massique et la diffusivité thermique. Ce phénomène est d'autant plus présent dans les flammes stratifiées, ce qui implique des forts gradients de richesse au sein de la flamme. Les différences de richesse dans le mélange entraînent des diffusions supplémentaires.

Le comportement des espèces en fonction de la température est aussi observée. Pour des flammes non swirlées, ce comportement semble indépendant de la stratification lorsque les températures sont inférieures à 1700K. Les fractions massiques de monoxyde de carbone et de dihydrogène varient pour des températures supérieures. Ces variations sont attribuées à des mélanges plus riches au niveau des produits, dans les cas stratifiés.

Pour des flammes swirlées, les fractions massiques de CO_2 , H_2O et O_2 ne sont pas affectées par la stratification. Par contre, les fractions massiques de monoxyde de carbone et de dihydrogène diffèrent sur toute la gamme de température entre des flammes de prémélange et des flammes stratifiées. Les fractions massiques de ces deux espèces sont élevées par la stratification dans l'espace des températures. Cela est d'autant plus vrai pour les flammes pauvres *back supported*. Une flamme "supportée par l'arrière" est une flamme dont les produits sont plus proches de la stœchiométrie que les réactifs. L'hypothèse des flamelettes, qui sera détaillée pour ce mode de combustion dans la section 3.7 est alors remise en cause.

Une autre observation intéressante apportée par cette étude est que le swirl tend à augmenter le degré de stratification.

Dans cette thèse, seule une structure de stratification sera observée dans les cas laminaires. Pour le cas turbulent, le mélange est imposé par la reproduction d'une expérience. Les effets de la distribution de mélange sur la combustion stratifiée ne pourront pas être examinés. La diffusion différentielle des espèces sera quant à elle observée.

2.5 Vitesses de flamme et limites d'inflammabilité

Les études portant sur la topologie d'une flamme stratifiée ont mis en évidence une modification de la vitesse de flamme lors de la rencontre d'un gradient de richesse. Différentes études expérimentales et numériques décrivant et expliquant les raisons de ce phénomène sont ici présentées.

2.5.1 Etudes expérimentales

Pasquier *et al.* [133] réalisent une étude sur les vitesses de flammes stratifiées turbulentes. La stratification du mélange est obtenue par l'injection d'un mélange riche dans un volume fermé contenant initialement un mélange pauvre. Le diamètre de l'injecteur axi-symétrique ainsi que la vitesse instationnaire du jet de mélange riche pénétrant dans le domaine induisent un écoulement turbulent ainsi qu'une stratification du mélange. Lorsque la stratification est établie, le mélange est allumé à l'aide d'électrodes. La propagation de la flamme dans le milieu stratifié est observée. Grâce à la vélocimétrie par images de particules (PIV) ainsi qu'à la fluorescence induite par laser (LIF), différentes mesures sont effectuées sur la flamme. Des champs de vitesse et de richesse instantanés sont obtenus, figure 2.7. Des mesures de vitesses de gaz frais conditionnées aux valeurs de richesses locales sont réalisées.

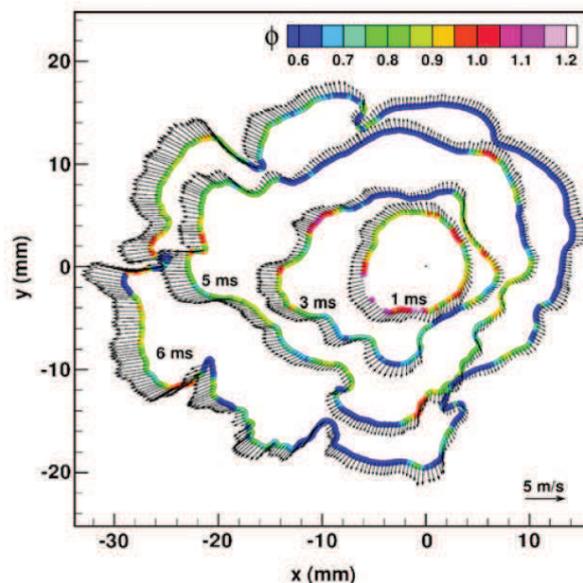


Fig 2.7 – Vitesses instantanées (flèches) et richesse (couleur) au niveau du front de flamme à différents instants après l'allumage, extrait de [133].

Cette étude montre que la propagation de la flamme est favorisée par les grands gradients de

stratification. Néanmoins, les mesures conditionnées montrent que la vitesse de flamme locale peut être inférieure ou supérieure à la vitesse d'une flamme homogène de même richesse locale.

La configuration étudiée par Pasquier *et al.* [133] est reprise dans l'étude de Balusamy [11]. Jusqu'à présent, le point d'allumage était à la richesse stœchiométrique. Dans cette nouvelle étude, la richesse est augmentée pour passer d'une stratification d'un mélange légèrement riche à un mélange globalement pauvre. Il en résulte que le fait d'allumer dans un mélange légèrement riche améliore la propagation de la flamme par rapport à un allumage au niveau d'un mélange stœchiométrique. La présence de mélange riche au niveau du front de flamme produit des gaz brûlés plus chauds qui vont favoriser la propagation de la flamme au sein de mélanges sensiblement pauvres et permettent de repousser les limites de flammabilité.

Malgré la difficulté, plusieurs études ont tenté de réaliser un écoulement laminaire stratifié, contrôlable et reproductible. En particulier, Balusamy [11] complète son étude en observant l'expansion d'un noyau dans un domaine laminaire. Il propose une nouvelle méthode de mesure de vitesse de flamme locale [12], particulièrement bien adaptée à la combustion stratifiée. Trois niveaux de stratification sont étudiés, riche à pauvre, proche stœchiométrie à pauvre et pauvre à pauvre. Il montre que la propagation de la flamme est augmentée par la stratification et cela d'autant plus que le degré de stratification est grand. Par contre, il trouve que le temps de relaxation de la flamme est indépendant du degré de stratification, comme illustré sur la figure 2.8. Le temps de relaxation correspond à la décroissance de la courbe, au temps nécessaire

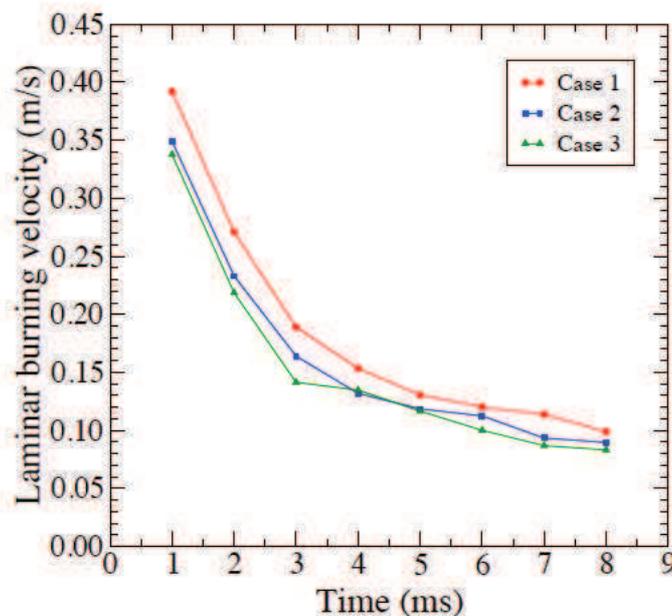


Fig 2.8 – Evolution de la vitesse laminaire de flamme non étirée. Cas 1 : $\phi = 1.24$ à 0.6, Cas 2 : $\phi = 0.95$ à 0.6, Cas 3 : $\phi = 0.8$ à 0.6, d'après [11].

pour atteindre la vitesse laminaire du mélange le plus pauvre.

Ra [153] avait déjà réalisé une étude similaire dans laquelle il concluait que la flamme présentait un effet mémoire. Celui-ci se traduit par le fait que la flamme se propage plus rapidement que la vitesse de flamme d'une flamme homogène de même richesse locale lorsque la flamme se propage de la zone riche vers la zone pauvre. Cet effet mémoire provient selon lui de la plus forte température des gaz brûlés dans la région riche qui aide la flamme à se développer en milieu pauvre. Par conséquent, il n'est plus possible de prédire la vitesse de flamme uniquement à partir de la composition des gaz brûlés. Les conditions des gaz déjà brûlés doivent aussi être

prises en considération.

Dans des études plus récentes, Kang *et al.* [90, 91, 92] examinent l'influence de la stratification sur les vitesses de propagation de flamme. Le dispositif expérimental utilisé est schématisé sur la figure 2.9. Il est basé sur l'équilibre entre les phénomènes de diffusion et de convection créant

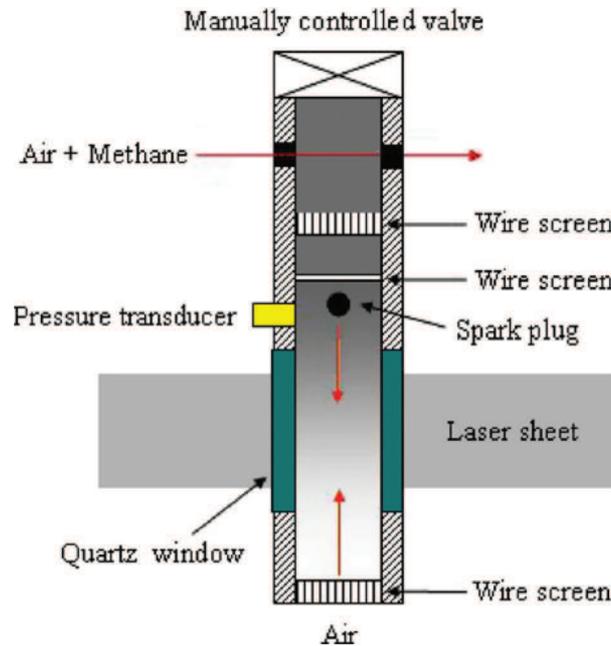


Fig 2.9 – Dispositif expérimental pour l'étude de la combustion stratifiée, extrait de [91].

une stratification contrôlée par le flux convectif. Grâce à celui-ci, il montre que les flammes se propageant dans un milieu stratifié peuvent atteindre des vitesses jusqu'à deux fois supérieures à celles attendues dans des mélanges homogènes de richesse égale à celle du mélange local. De plus, la gamme de richesse étudiée montre que la limite d'inflammabilité côté pauvre est repoussée. En effet, avec leur configuration, la limite d'inflammabilité d'un mélange homogène méthane-air est $\phi = 0.58$. En allumant le mélange à une richesse plus élevée, la flamme peut se propager jusqu'à des mélanges de richesse $\phi = 0.35$. Cependant, ils n'arrivent pas à établir une relation claire entre la vitesse de flamme et le gradient de richesse.

2.5.2 Etudes numériques

Les expérimentateurs [91, 153] ont mis en évidence la présence d'un effet mémoire de la flamme provenant de la température des gaz brûlés. Cet effet mémoire, tout comme la diffusion des espèces au sein de la flamme, implique des difficultés à la réalisation de flammes stratifiées numériques.

Pires Da Cruz *et al.* [44] simulent des flammes adiabatiques méthane/air en propagation libre mono-dimensionnelles. L'avantage de telles flammes est qu'elles ne sont pas soumises à l'étirement. Seul l'effet de la stratification est observé. L'étude est de plus relativement complète puisqu'elle couvre les trois types de stratification présentés dans la section 2.2, à savoir pauvre à pauvre, riche à riche et riche à pauvre ou pauvre à riche. Pour prendre en compte l'effet mémoire de la flamme trouvé dans les études expérimentales, la simulation numérique est réalisée avec une cinétique et un transport détaillés.

Le but est d'analyser l'effet de la stratification sur la vitesse de flamme laminaire. De ce fait, la vitesse laminaire des flammes observées est comparée à celle de flammes homogènes de même richesse. Le résultat obtenu pour la flamme allant d'un mélange stœchiométrique à un mélange

pauvre de richesse $\phi = 0.35$ est représenté sur la figure 2.10.

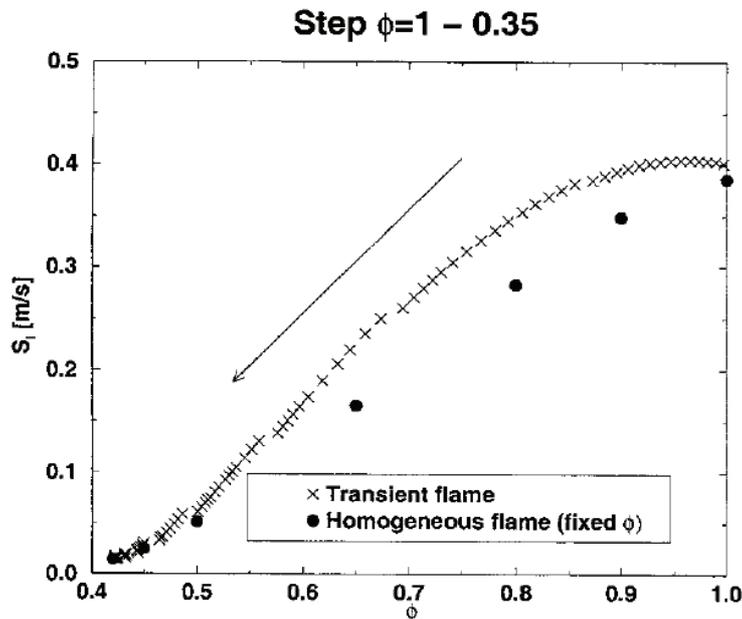


Fig 2.10 – Comparaison de la vitesse laminaire entre des flammes homogènes et une flamme hétérogène passant de la stœchiométrie à la richesse $\phi = 0.35$, extrait de [44].

Cette image montre clairement que la stratification tend à accélérer la vitesse de flamme. L'effet mémoire de la flamme est bien pris en compte par la simulation numérique. Cet effet mémoire dépend du type de stratification rencontré et est lié à la cinétique chimique ainsi qu'aux transports de masse et de chaleur. Selon cette étude, les flammes pauvres stratifiées sont contrôlées par la température des gaz brûlés qui les rend plus rapides que des flammes homogènes de richesse équivalente. Cette conclusion est en accord avec les travaux de Ra [153] présentés précédemment. Pour une stratification de classe 2, la flamme est contrôlée par le nombre de molécules d'hydrogène produites ou consommées dans le front de flamme et dans les gaz brûlés. L'accélération ou la décélération de la vitesse de flamme dépend du sens de la stratification.

La vitesse d'une flamme stratifiée sera étudiée en détails au cours de cette thèse, que ce soit la vitesse absolue ou la vitesse laminaire. L'expérience de Balusamy [11] présentée dans cette section sera reproduite de manière numérique. De nouvelles conclusions pourront donc être apportées à celles déjà données ici.

2.6 Flammes stratifiées à contre-courant

Une flamme à contre-courant est initialement le nom donné aux flammes prenant place à la rencontre d'un jet d'oxydant et d'un jet de carburant, s'opposant géométriquement.

Marzouk *et al.* [119] font appel à cette configuration pour étudier les flammes stratifiées de manière numérique. Afin de caractériser précisément la flamme ainsi que sa réponse à la stratification, une chimie et un transport détaillés sont utilisés. La simulation est réalisée en une dimension, selon la coordonnée normale à la surface de flamme. Ils remplacent les jets d'oxydant et de carburant par un jet de mélange frais à une certaine richesse et un jet d'une autre richesse mais dont la composition et la température du mélange sont celles d'un mélange à l'équilibre,

sous des conditions adiabatiques et à pression constante. Le schéma d'une telle flamme est illustré sur la figure 2.11. Une stratification est créée par la diffusion de la température et des radicaux

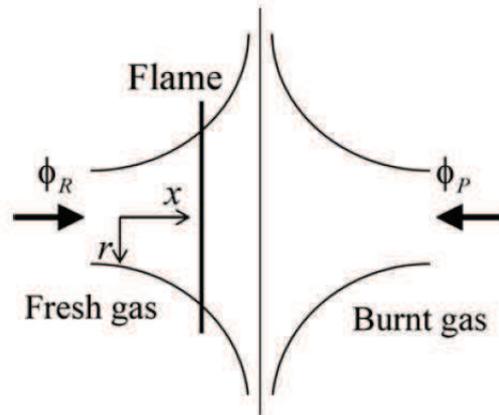


Fig 2.11 – Schéma d'une flamme stratifiée à contre courant, extrait de [207].

qui agissent comme un "réservoir" de chaleur. Ce "réservoir" permet de repousser les limites d'inflammabilité côté pauvre. Ils observent, tout comme Pires Da Cruz *et al.* [44] que pour des flammes pauvres, la vitesse de flamme est augmentée comparée à celle des flammes homogènes de richesse équivalente.

En 2010, Richardson *et al.* [157] étudient eux aussi ce type de flamme. En plus d'étudier les flammes à contre-courant réactifs/produits, ils observent aussi des flammes stratifiées à contre-courant réactifs/réactifs. Dans ce dernier cas, les deux jets possèdent la même richesse mais celle-ci varie temporellement. Leur étude est mono-dimensionnelle, c'est pourquoi ils sont obligés de se limiter à des flammes normales au gradient de richesse. Ils utilisent un transport et une chimie complexes. Ils proposent ici une définition de la propagation d'une flamme stratifiée basée sur la vitesse de déplacement d'une iso-surface de la variable de progrès. La variable de progrès dépend de la fraction de mélange, donnée par la définition de Bilger [16]³. Cette vitesse de déplacement est composée de trois parties, la réaction, la diffusion, et la dissipation croisée.

Cette décomposition permet d'expliquer la réponse de la flamme à la stratification et à la dynamique de l'étirement instationnaire. La partie diffusive possède la réponse la plus rapide aux variations du taux d'étirement de la flamme. Les parties réactionnelles et dissipatives, quant à elles, dépendent plus de la vitesse du fluide et des échelles de temps de la flamme. La partie diffusive est affectée par l'étirement. Elle modifie les coefficients de diffusion ce qui entraîne une propagation de la flamme vers des mélanges plus riches, pour des flammes "back supported" et inversement à propager la flamme vers des mélanges plus pauvres pour les flammes "front supported". Par conséquent, la partie réactionnelle est elle aussi affectée.

Les flammes supportées par l'arrière montrent des vitesses de propagation plus importantes et des épaisseurs plus faibles que les flammes supportées par l'avant possédant des réactifs plus riches que les produits.

Récemment, Zhou *et al.* [207] ont poursuivi les recherches sur de telles flammes. Ils regardent le comportement de la flamme en fonction du ratio ϕ_P sur ϕ_R , noté θ . ϕ_R et ϕ_P désignent respectivement la richesse du flux de gaz frais et la richesse du flux de gaz brûlés, comme représenté sur la figure 2.11. Lorsque θ est supérieur à un, le taux de dégagement de chaleur est plus important que celui d'une flamme prémélangée de même richesse locale. Dans des conditions

3. Cette définition est détaillée dans la section 3.4.4.1.

de mélange pauvre, cette augmentation du dégagement de chaleur est attribuée au support thermique tandis qu'elle est attribuée à la diffusion de certaines espèces dans des conditions de mélange riche. Ils remarquent aussi que les limites d'inflammabilité sont augmentées, que ce soit du côté pauvre ou du côté riche.

2.7 Résumé sur la stratification

Les études présentées ici permettent de récapituler les principales caractéristiques des flammes stratifiées. Celles-ci ne constituent pas une liste exhaustive mais permettent de rendre compte des principaux effets de la stratification. D'autres expériences et simulations numériques ont été réalisées à ce sujet [60, 172, 171]. Les principales caractéristiques sont ici résumées :

- la combustion est réalisée en deux étapes pour certaines classes de stratification [77, 79] ;
- le champ d'hétérogénéité modifie la forme de la flamme et par conséquent ses plissements [8, 62, 190] ;
- la stratification modifie l'évolution des espèces majoritaires dans la flamme [177, 178, 179] ;
- les flammes stratifiées présentent un effet mémoire [44, 153] ;
- les limites d'inflammabilité sont étendues du côté pauvre et du côté riche [11, 91, 92] ;
- la vitesse de flamme est dépendante de la stratification [60, 90, 91, 92, 119] ;
- la stratification entraîne une modification du taux de dégagement de chaleur [77, 207] ;
- du côté pauvre, la flamme est favorisée par le gradient thermique tandis que la diffusion des espèces est plus importante du côté riche [44, 153].

Ces études montrent l'étendue du champ d'investigation sur les flammes stratifiées et la diversité des dispositifs servant à leur réalisation. Il en ressort qu'il est extrêmement difficile de mesurer certaines propriétés, comme la densité des gaz brûlés par exemple. Les études numériques peuvent fournir des informations supplémentaires à la condition que les modèles utilisés soient suffisamment pertinents. Un paragraphe lié à la modélisation de telles flammes est présenté dans la section 3.7. En effet, l'approche DNS ne permet pas des études de grande taille.

2.8 Prise en compte des gaz brûlés

Le but de cette thèse étant de comprendre le comportement de la flamme en situation de dilution par des gaz brûlés, quelques études déjà effectuées à ce propos sont ici recensées.

Les différentes technologies moteur ont été explicitées dans le chapitre d'introduction 1. Des études permettant de comprendre l'impact des EGR sur la combustion sont d'abord présentées. Puis, les études présentant des cas de dilution/stratification par des EGR ou des IGR sont évoquées. Ces dernières restent cependant très limitées. La composition des gaz brûlés est très difficile à contrôler de manière expérimentale. Du point de vue numérique, ces gaz impliquent des modélisations difficiles à mettre en œuvre. En effet, soit chaque espèce doit être transportée, ce qui implique un calcul extrêmement coûteux et un domaine limité, soit des modifications doivent être apportées aux modélisations actuelles, présentées dans la section 3.5.

2.8.1 Modifications des caractéristiques de la combustion par les EGR

Afin de déterminer les différents effets des EGR sur la combustion et les émissions de polluants pour des moteurs diesels à injection directe, une étude expérimentale a été effectuée par Maiboom *et al.* [113]. Les auteurs essaient de distinguer les effets des EGR sur la combustion de ceux sur les émissions. L'injection se fait avec ou sans injection pilote. L'injection pilote permet

de créer une première injection d'une petite quantité de carburant afin d'amorcer la combustion. Au point étudié, lorsqu'une injection pilote est présente, la flamme prenant place dans le moteur est une flamme de diffusion. Au contraire, sans cette injection, la combustion s'effectue quasi entièrement de manière prémélangée.

Ils aboutissent à plusieurs constatations. Tout d'abord, aucune conclusion ne peut être effectuée quant à l'augmentation de la température générée par les EGR. Plusieurs tests sont effectués avec des températures d'entrée différentes pour un même taux d'EGR. Les changements de température ont un impact positif ou négatif sur les émissions de NO_x . Dans certaines conditions, les émissions de NO_x sont plus faibles pour des températures d'entrée plus élevées.

Dans le cas des flammes de diffusion, pour un ratio carburant/air constant, le taux de dégagement de chaleur n'est pas modifié lorsque la température d'entrée ou le taux d'EGR sont modifiés.

Ils montrent qu'il est possible d'avoir très peu d'émissions de NO_x et de suie lorsque le moteur fonctionne à faible charge avec un fort taux d'EGR. Cependant, ce type de fonctionnement entraîne une augmentation de la consommation spécifique, pouvant être supérieure à 10 %, ainsi qu'une augmentation des émissions de monoxyde de carbones et d'hydrocarbonés. Pour certaines conditions opératoires, il est possible de réduire les émissions de NO_x sans pénaliser la consommation de carburant et les émissions de suie. Néanmoins, les effets opposés peuvent être observés pour d'autres conditions.

2.8.2 Impact de la composition des EGR sur la combustion

Il est difficile de parler de l'impact des EGR sur la combustion sans connaître précisément la composition de ceux-ci. L'impact des propriétés des gaz d'échappement sur l'initiation et le déroulement de la combustion est examiné dans la thèse de Piprel [146].

Dans une première partie, l'auteur étudie l'influence des réglages du moteur et du carburant employé sur la composition des gaz brûlés. Il est constaté que le point de fonctionnement du moteur a une influence sur la composition des gaz brûlés, que ce soit pour les polluants réglementés ou les polluants non réglementés. La composition des EGR peut être modifiée en fonction du régime moteur.

Ensuite, la composition réelle des gaz brûlés ainsi que la modification qui s'opère durant leur traversée du circuit de recirculation est observée. L'influence des différentes espèces présentes dans les gaz brûlés sur l'initiation et le déroulement de la combustion est ensuite approfondie, table 2.1.

Espèces ajoutées	Initiation de la combustion principale	Durée de fin de combustion
NO_x	promotion	baisse importante
CO	légère promotion	baisse
C_2H_4	légère inhibition	équivalente
C_3H_4	légère inhibition	baisse
aldéhydes	promotion	baisse
alcools	inhibition	augmente

Tableau 2.1 – Impact de certaines espèces présentes dans les EGR sur l'initiation et le déroulement de la combustion principale, moteur HCCI, extrait de [146].

L'auteur conclut dans cette partie que le fait d'incorporer certaines espèces dans le carburant

initial permettrait de faire varier la composition des gaz brûlés. De plus, une modification non négligeable de la composition des gaz brûlés entre le moment où ils sortent de la chambre de combustion et celui où ils sont réinjectés est observée. De nombreux phénomènes physiques et chimiques se produisent dans le circuit de refroidissement.

Pour finir, le contrôle de la combustion HCCI par les gaz brûlés est examiné. Une composition optimisée des gaz brûlés permettrait un contrôle de la combustion. Cependant, obtenir une composition précise de gaz brûlés à la fin de la combustion n'est pas une chose facile à réaliser.

2.8.3 Stratification gaz frais/EGR

Il a été montré que pour des grands taux d'EGR, un mélange homogène pouvait causer une combustion incomplète ou des instabilités. Pour des forts taux de dilution, il peut alors paraître opportun de séparer le mélange air/carburant des EGR durant les phases d'admission et de compression. Les sections précédentes ont montré que de nombreuses configurations permettant de réaliser une stratification en gaz frais étaient possibles. Il en est de même pour les stratifications en gaz brûlés.

Dans leur étude, Dong *et al.* [50] présentent deux concepts dans lesquels les gaz frais sont séparés des gaz brûlés. Ceux-ci sont étudiés de manière numérique et représentés sur la figure 2.12. La structure "Corndog" est produite grâce aux soupapes d'admission et d'échappement

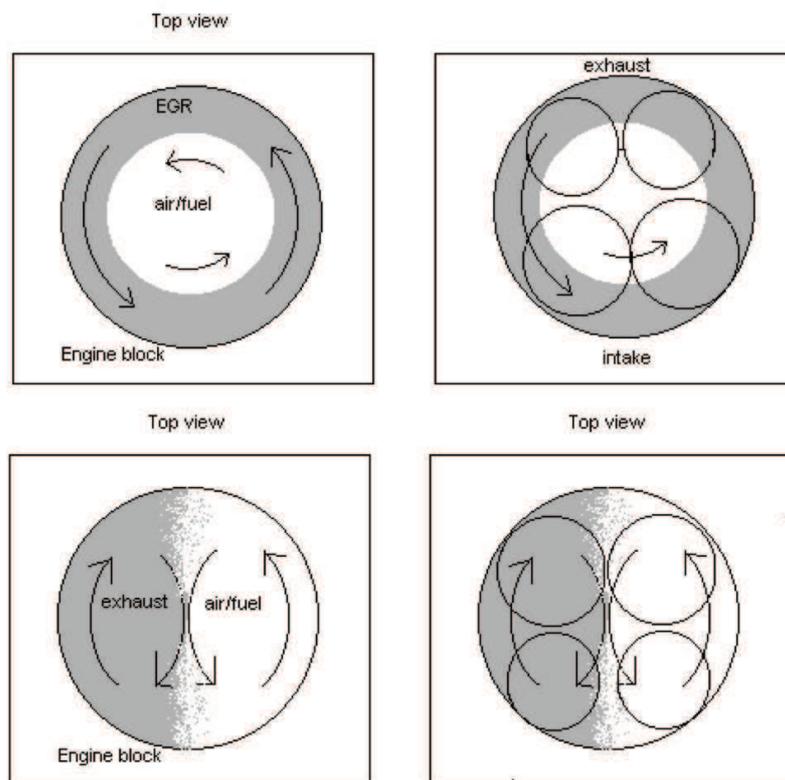


Fig 2.12 – Représentation des deux concepts permettant la stratification EGR. Haut : concept "Corndog". Bas : Concept des vortex conjugués. Les parties grisées comportent des EGR tandis que les parties blanches sont composées d'un mélange frais air/carburant.

ainsi qu'à la distribution variable. Les EGR sont attirés vers le mur du cylindre et le mélange de gaz frais est situé au centre. Un mouvement de swirl est ajouté aux deux mélanges. Dans la structure "Conjugated vortex", le mélange air/carburant se situe d'un côté de la chambre tandis

que le mélange EGR se place de l'autre côté. Les intensités des vortex doivent être les mêmes mais les directions des swirls des deux mélanges sont opposées.

Plusieurs variations sont effectuées au niveau du dôme de combustion ainsi que des conduits d'admission et d'échappement afin de déterminer quelles sont les conditions idéales pour atteindre les structures proposées.

Ils concluent de leurs simulations que la structure et les caractéristiques du fluide contenu dans le cylindre sont fortement dépendantes des systèmes d'admission et d'échappement. Des conditions parfaites (dôme plat, conduits d'admission et d'échappement parfaitement circulaires) rendent la structure "Corndog" atteignable. Cependant il ne s'agit pas de conduits existants sur des moteurs à l'heure actuelle.

Les deux structures restent très difficiles à réaliser, principalement pour les mêmes raisons. Tout d'abord, le flux de chaleur accélère le mélange entre les gaz frais et les EGR. Deuxièmement, les gaz brûlés résiduels (IGR) des cycles précédents aggravent le mélange gaz frais/EGR à cause de la diffusion massique, du transfert de chaleur et de l'inertie. Les fluctuations de pression dans les conduits d'admission et d'échappement perturbent les deux structures. Plus spécifiquement pour le concept "Corndog", la force centrifuge tente de pousser les gaz frais possédant une plus forte densité vers l'extérieur. Cette étude présente la formation du mélange mais malheureusement ne précise pas l'impact de celui-ci sur la combustion.

Plus récemment, Choi *et al.* [38] étudient de manière expérimentale le potentiel de la stratification gaz frais/EGR sur la combustion ainsi que sur les émissions polluantes. Une telle stratification permet d'augmenter ou de diminuer la concentration locale d'EGR là où la combustion se produit. La stratification est ici réalisée dans un mono-cylindre. Celui-ci est composé d'un piston à deux étages, de deux conduits d'admission et de deux conduits d'échappement. Cette forme de piston, présentée sur la figure 2.13, permet d'augmenter le degré de stratification et les conduits permettent d'améliorer la distribution d'EGR. En effet, un conduit est hélicoïdal et l'autre tangentiel. Un chanfrein est créé sur le conduit tangentiel.

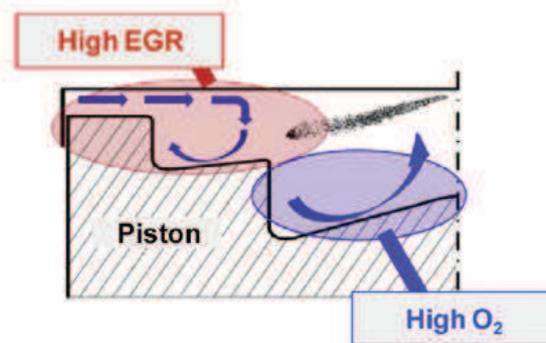


Fig 2.13 – Schéma du piston à deux étages, de la stratification et du spray souhaités, extrait de [38].

L'injection d'EGR est réalisée de manière asymétrique en injectant les EGR dans l'un ou l'autre des conduits. Dans le second conduit, seul de l'air sera injecté. Selon l'injection réalisée, les caractéristiques de la combustion et des émissions sont modifiées.

Lorsque les EGR arrivent par le conduit tangentiel, une région d'EGR se forme dans la partie centrale supérieure de la chambre de combustion, comme montré sur la figure 2.14, a. Par conséquent, la combustion est initiée dans une zone pauvre en EGR. Cette combustion est à l'origine de fortes émissions de NO_x mais la production de particule est réduite de 30%. A

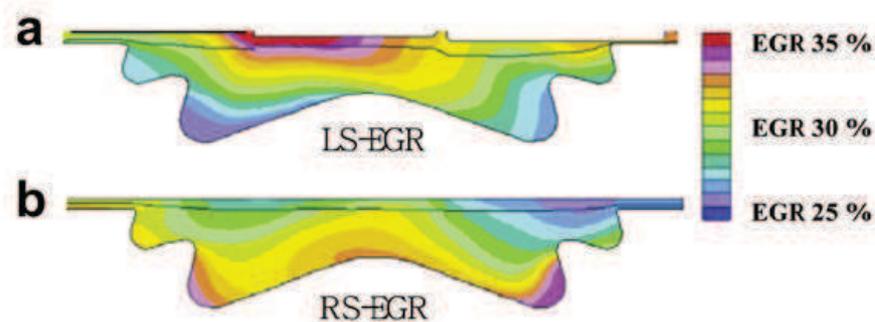


Fig 2.14 – Stratification en EGR présente dans le cylindre en fonction de l’injection, extrait de [38]. a : configuration LS-EGR, les EGR arrivent par le conduit tangentiel. b : configuration RS-EGR, les EGR arrivent par le conduit hélicoïdal.

contrario, lorsque les EGR entrent par le conduit hélicoïdal, la situation inverse se produit. Les EGR se situent sur la circonférence et au fond de la chambre de combustion (figure 2.14, b) : la combustion s’effectue dans un milieu riche en EGR. Cette configuration présente l’avantage de réduire les émissions de NO_x de 6 % mais émet plus de particules. L’ajout d’un swirl dans la configuration RS-EGR maximise l’effet de la stratification en EGR et a des effets positifs sur les NO_x , les particules et le CO .

La robustesse de ces effets a été vérifiée dans de nombreuses conditions opératoires. Pour de fortes charges, un faible taux d’EGR et une grande pression d’injection, la stratification en EGR n’est pas très efficace.

2.8.4 Effets des hétérogénéités des résidus de gaz brûlés.

Très récemment, Pera *et al.* [137] ont cherché à comprendre les effets des hétérogénéités des résidus de gaz brûlés sur la variabilité cycle à cycle d’un moteur. Pour cela, ils ont réalisé une simulation numérique directe. La prise en compte d’un schéma semi-détaillé (Hasse *et al.* [75]) se révèle alors obligatoire. Le carburant utilisé ici est de l’iso-octane pour rendre compte pleinement des phénomènes se produisant dans un moteur. La discrétisation spatiale est fixée à $10 \mu\text{m}$. Cette discrétisation permet de capter les structures les plus fines de l’écoulement réactif (turbulence et flamme). Le fait de transporter un nombre d’espèces conséquent et de limiter la taille de maille impliquent un temps de calcul relativement élevé. Par conséquent, l’étude se trouve restreinte au niveau de la taille du domaine simulé. La plupart des cas sont réalisés en deux dimensions, sur un carré de 4 mm de côté. La durée physique simulée est très courte puisqu’elle n’est que de $700 \mu\text{s}$. La réponse de la flamme à la dilution en gaz brûlés chauds ainsi qu’aux fluctuations de température est observée à la fois dans un milieu laminaire, figure 2.15, et dans un milieu turbulent.

Les cas laminaires permettent d’isoler les effets des hétérogénéités sur les plissements de la flamme. Lorsque des hétérogénéités de température sont présentes dans le domaine, la flamme est déformée. Ce phénomène est visible sur la figure 2.15. La flamme est accélérée lorsqu’elle rencontre des poches de gaz chauds et au contraire décélérée par des poches de gaz froids. Des observations similaires sont réalisées avec la dilution en gaz brûlés. Lorsque les poches rencontrées sont faiblement diluées, la flamme a tendance à accélérer alors qu’elle sera ralentie par des forts taux de dilution. Les modifications liées à la dilution en gaz brûlés restent moindres en comparaison à celles apportées par les hétérogénéités en température. Pour les cas turbulents, les effets des hétérogénéités locales se retrouvent voilés par la turbulence. Par contre, l’influence

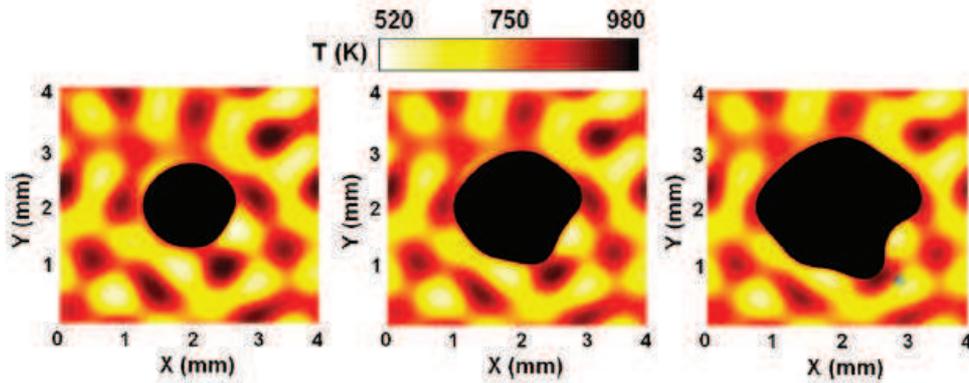


Fig 2.15 – Propagation d’une flamme laminaire dans un milieu de température hétérogène, extrait de [137].

des gaz brûlés résiduels sur les fluctuations du dégagement de chaleur est importante.

Ces résultats permettent de caractériser les effets des résidus de gaz brûlés sur la variabilité cycle à cycle. Ils démontrent aussi qu’une modélisation basée sur une chimie globale risque de ne pas rendre compte de ces effets.

2.9 Conclusion

Les études présentées dans cette partie ont montré l’intérêt de la stratification, que ce soit en richesse ou en gaz brûlés. La flamme peut en effet se propager dans des milieux peu voire non inflammables grâce à son effet mémoire. Cependant toutes les caractéristiques de la flamme sont modifiées, que ce soit au niveau de sa topologie ou de sa vitesse. Les études sur les gaz brûlés montrent de plus que la distribution de la stratification a un impact sur le déroulement de la combustion. Différents effets sont observés et retrouvés dans plusieurs études mais il est encore difficile d’en tirer des généralités sur la combustion stratifiée. La compréhension des phénomènes physiques engendrés par la stratification/dilution reste un champ de recherche à explorer. Les travaux effectués au cours de cette thèse s’inscrivent dans cet axe. Cependant, tous les effets présentés dans ce chapitre ne pourront pas être analysés. Les études se concentreront sur la vitesse et la forme d’une flamme en propagation dans un milieu stratifié. L’observation se déroulera dans un premier temps dans un milieu laminaire à partir d’une configuration similaire à celle de Balusamy [11]. En effet, elle permet d’avoir une comparaison numérique/expérimental. De plus, il sera ainsi possible de distinguer les effets dus à la stratification de ceux dus à la turbulence. L’introduction de la turbulence se fera grâce à la reproduction de la seconde partie de l’expérience de Balusamy [11] présentée dans ce chapitre. Enfin, des études présentant des stratifications gaz frais/gaz brûlés seront abordées.

Ce chapitre a aussi montré les difficultés rencontrées lors de la réalisation d’expériences et de simulations sur les flammes stratifiées. Seules des simulations numériques seront ici effectuées. Par conséquent, le prochain chapitre est dédié aux techniques de modélisation, plus spécifiquement axé sur celles utilisées au cours de cette thèse. Une attention particulière sera portée quant à la modélisation de la combustion partiellement prémélangée.

Sommaire

3.1	Introduction	47
3.2	Equations régissant l'aérothermochimie	48
3.2.1	Equations de Navier-Stokes	48
3.2.2	Approximation à faible nombre de Mach	49
3.3	Propriétés du mélange et thermodynamique	50
3.3.1	Propriétés du mélange	50
3.3.2	Thermodynamique	51
3.3.3	Flux diffusifs	53
3.3.4	Résultats de la théorie de la cinétique des gaz	54
3.3.5	Calcul de la viscosité de cisaillement du mélange	57
3.3.6	Calcul de la conductivité thermique du mélange	57
3.3.7	Calcul des coefficients de diffusion de mélange moyennés	57
3.4	Chimie détaillée	58
3.4.1	Réaction globale	58
3.4.2	Classification des réactions chimiques	59
3.4.3	Raideur d'un système chimique	61
3.4.4	Variables caractéristiques d'une flamme	63
3.5	Modélisation de la chimie	66
3.5.1	Schéma globaux	66
3.5.2	Chimie tabulée	66
3.6	Introduction à la turbulence	70
3.6.1	Echelles et nombres caractéristiques de la turbulence	70
3.6.2	Modélisation de la turbulence	72
3.6.3	Prise en compte de la turbulence dans la modélisation de la chimie	74
3.7	Extension à la combustion stratifiée	76
3.8	Vitesses de flamme	77
3.8.1	Vitesses d'une flamme plane laminaire non étirée	78
3.8.2	Vitesses d'une flamme sphérique en expansion	80
3.8.3	Vitesse turbulente	82
3.9	Conclusion	82

3.1 Introduction

Les sections précédentes ont montré la diversité des modes de combustion. Dans cette thèse, la combustion stratifiée sera uniquement étudiée d'un point de vue numérique. Cette section présente des outils de modélisation présents dans le code de calcul YALES2 [1], code utilisé pour réaliser les simulations présentées dans la suite de cette thèse. La dernière partie de ce chapitre

sera consacrée à la présentation des vitesses de flamme. Il s'agit en effet du paramètre le plus étudié au cours des calculs qui seront effectués. Une bonne compréhension des différentes vitesses est donc essentielle.

3.2 Equations régissant l'aérothermochimie

3.2.1 Equations de Navier-Stokes

Dans un milieu continu, le comportement des fluides est régi par le système des équations de Navier-Stokes. Ces équations aux dérivées partielles (EDP) traduisent au niveau microscopique la conservation de la masse, la quantité de mouvement et l'énergie. Chacune de ces grandeurs est au centre d'une équation différentielle. A ces équations s'ajoute la conservation des espèces chimiques, qui implique de résoudre une équation de transport pour chaque espèce présente dans le mécanisme chimique. Ces équations sont données ci-dessous sous leur forme conservative. La notation classique d'Einstein sur les indices répétés est adoptée. Pour chaque composante i , $j = 1, 2$ ou 3 (en coordonnées cartésiennes).

La conservation de la masse est donnée par

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0, \quad (3.1)$$

où ρ est la masse volumique du fluide et u_i la composante du vecteur vitesse selon la direction i .

La conservation de la quantité de mouvement s'écrit,

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \rho u_i u_j = -\frac{\partial P}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i}, \quad (3.2)$$

avec P la pression locale et τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses. Pour un fluide Newtonien, ce dernier est défini selon

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (3.3)$$

où μ désigne la viscosité dynamique du fluide (dépendant de T et de la composition locale) et δ_{ij} et le symbole de Kronecker.

La conservation de l'enthalpie sensible peut s'écrire

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) = \dot{\omega}_T + \frac{DP}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q}, \quad (3.4)$$

avec h_s l'enthalpie sensible et λ la conductivité thermique. Deux termes sources sont présents dans cette équation : \dot{Q} qui correspond au terme source volumique et $\dot{\omega}_T$ qui est le terme source d'énergie chimique. Dans la suite du manuscrit, le terme source volumique est omis, car aucune force de volume n'intervient. Une nouvelle vitesse apparaît ici, $V_{k,i}$, la vitesse de diffusion de l'espèce k suivant la direction i .

Le terme source d'énergie chimique est lié au dégagement de chaleur produit lors de la combustion et est fonction des enthalpies de formation des espèces,

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{spe}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k, \quad (3.5)$$

où $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie massique de formation de l'espèce k à la température de référence $T_0 = 298.15$ K. N_{spe} correspond au nombre d'espèces présentes dans le mécanisme. Le terme source de l'espèce k est noté $\dot{\omega}_k$.

La dernière équation est celle pour la conservation des espèces,

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_k, \quad (3.6)$$

où Y_k correspond à la fraction massique de l'espèce k .

Afin de fermer ces équations, une équation d'état est nécessaire. Cette dernière équation a pour but de lier la pression, la masse volumique et la température. Ici, l'hypothèse de gaz parfait est utilisée, la loi d'état est donc donnée par

$$P = \rho r T \quad \text{avec} \quad r = c_p - c_v, \quad (3.7)$$

où c_p et c_v sont les capacités calorifiques massiques, respectivement à pression constante et à volume constant. Leur calcul sera explicité plus loin dans ce chapitre.

L'équation de la conservation de la masse, équation (3.1), et celles de la conservation des espèces, équations (3.6), sont linéairement dépendantes. Si chaque espèce est transportée, la résolution de l'équation (3.1) est redondante car elle s'obtient comme somme sur les k des (3.6) équations. Cependant, celle-ci est conservée dans YALES2. En effet, l'équation de conservation de la masse permet d'évaluer un prédicteur de densité. La résolution numérique de ce système sera détaillée dans la section B.3.

3.2.2 Approximation à faible nombre de Mach

Dans de nombreuses applications industrielles, la vitesse de l'écoulement, u , se révèle relativement faible devant la célérité du son, c . Ce régime d'écoulement est qualifié d'écoulement à faible nombre de Mach (LMN : "Low Mach Number"). Cette appellation provient du rapport entre la vitesse du fluide et la vitesse du son qui est déterminé par le nombre de Mach : $M = u/c$. Un nombre de Mach très petit devant 1 implique une homogénéisation rapide de la pression dans le domaine. Les ondes acoustiques se propagent beaucoup plus rapidement que les ondes entropiques et les fluctuations de pression ont un effet négligeable sur les propriétés thermodynamiques. La pression thermodynamique peut alors être considérée comme constante en espace, mais variable temporellement.

La variation de la masse volumique due aux effets de compressibilité n'est plus présente. Cependant, les effets de dilatation dus au changement de température restent présents, ainsi que la variation de ρ par la rencontre de deux mélanges ne possédant pas la même masse volumique. L'hypothèse de fluide incompressible, permettant une simplification des équations de Navier-Stokes, ne peut donc pas être posée pour traiter des écoulements réactifs.

Majda et Sethian [114] proposent une approche intermédiaire, située entre la formulation compressible et la formulation incompressible, dite formulation à faible nombre de Mach. Afin de passer les équations de Navier-Stokes sous l'approximation faible nombre de Mach, il est nécessaire d'effectuer une adimensionnalisation des différentes variables de l'écoulement, grâce à des valeurs de référence.

Les nouvelles variables sont définies par

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_\infty}; \quad \mathbf{u}^* = \frac{\mathbf{u}}{\mathbf{u}_\infty}; \quad h_s^* = \frac{h_s}{c_{2\infty}^2}; \quad P^* = \frac{P}{(\rho_\infty c_{2\infty}^2)}; \quad t^* = \frac{t}{t_0}; \quad x_i^* = \frac{x_i}{L_0}. \quad (3.8)$$

Les variables dépendantes sont développées en puissance du nombre de Mach $M_\infty = u_\infty/c_\infty$,

$$\rho^* = \rho_0^* + M_\infty \rho_1^* + M_\infty^2 \rho_2^* + \mathcal{O}(M_\infty^3), \quad (3.9)$$

$$\mathbf{u}^* = \mathbf{u}_0^* + M_\infty \mathbf{u}_1^* + M_\infty^2 \mathbf{u}_2^* + \mathcal{O}(M_\infty^3), \quad (3.10)$$

$$h_s^* = h_{s,0}^* + M_\infty h_{s,1}^* + M_\infty^2 h_{s,2}^* + \mathcal{O}(M_\infty^3), \quad (3.11)$$

$$P^* = P_0^* + M_\infty P_1^* + M_\infty^2 P_2^* + \mathcal{O}(M_\infty^3), \quad (3.12)$$

En ne gardant que l'ordre zéro de ces développements et en les introduisant dans les équations adimensionnalisées de Navier-Stokes, les équations de Navier-Stokes sous l'approche faible nombre de Mach apparaissent. A l'ordre $1/M_\infty^2$, la pression absolue est constante en espace, $\nabla P_0 = 0$. A l'ordre $1/M_\infty$, les ondes acoustiques stationnaires sont éliminées, $\nabla P_1 = 0$. Par souci de simplification dans les notations, les * sont omis dans la suite.

La conservation de la masse à l'ordre zéro donne

$$\frac{\partial \rho_0}{\partial t} + \frac{\partial \rho_0 u_{0i}}{\partial x_i} = 0, \quad (3.13)$$

La conservation de la quantité de mouvement à l'ordre zéro s'écrit

$$\frac{\partial \rho_0 u_0}{\partial t} + \frac{\partial \rho_0 u_{0i} u_{0i}}{\partial x} = -\frac{\partial P_2}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{0ij}}{\partial x_i}, \quad (3.14)$$

La conservation de l'enthalpie sensible à l'ordre zéro se note

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_0 h_{s0}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_0 u_{0i} h_{s,0}) &= \frac{\partial P_0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_0 \frac{\partial T_0}{\partial x_i} \right) \\ - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho_0 \sum_{k=1}^N h_{s0,k} Y_k V_{0,k,i} \right) &+ \tau_{0,ij} \frac{\partial u_{0i}}{\partial x_j} + \dot{Q}_0, \end{aligned} \quad (3.15)$$

Pour la conservation des espèces, il en résulte

$$\frac{\partial \rho_0 Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho_0 (u_{0i} + V_{0,k,i}) Y_k) = \dot{\omega}_{0k}. \quad (3.16)$$

La pression P_0 , présente dans l'équation de l'enthalpie sensible, correspond à la pression thermodynamique du système. Il s'agit de la pression constante en espace. Cette pression sera aussi constante en temps si le domaine est ouvert mais sera modifiée temporellement dans un domaine fermé. Le terme P_2 qui apparaît dans l'équation de la quantité de mouvement agit quant à lui comme la pression hydrodynamique du système.

La densité ρ_0 dépend uniquement de la température et du mélange. Elle peut être trouvée par l'intermédiaire de l'équation d'état.

3.3 Propriétés du mélange et thermodynamique

3.3.1 Propriétés du mélange

La conservation des espèces entraîne la résolution d'une équation de transport par espèce présente dans le mécanisme réactionnel.

Plusieurs propriétés liées à l'espèce k doivent être fournies au code. Quelques notions de mélange, utiles à l'implantation de la chimie complexe dans le code de calcul, sont ici rappelées.

Tout d'abord, la densité du mélange, ρ . Celle-ci est simplement obtenue en sommant toutes les densités partielles des espèces ρ_k

$$\rho = \sum_k^{N_{spe}} \rho_k. \quad (3.17)$$

Cette densité permet de déduire les fractions massiques de toutes les espèces, Y_k ,

$$Y_k = \frac{\rho_k}{\rho}. \quad (3.18)$$

Par définition, la somme des fractions massiques est égale à 1. Nous avons vu dans la section 3.2.1 que dans YALES2, un système d'équations redondant était résolu. Ce système est composé de l'équation de conservation de la masse ainsi que des équations de conservation des espèces. La relation $\sum_k^{N_{spe}} Y_k = 1$ doit être déduite de ces équations. Les équations (3.1) et (3.6) permettent d'obtenir l'équation de conservation de ζ ,

$$\frac{\partial \rho \zeta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \zeta}{\partial x_i} = 0, \quad (3.19)$$

à partir de laquelle on retrouve $\zeta = \sum_k^{N_{spe}} Y_k = 1$.

La masse molaire du mélange, W , est évaluée à l'aide des fractions massiques et des masses molaires des espèces, W_k ,

$$\frac{1}{W} = \sum_k^{N_{spe}} \frac{Y_k}{W_k}. \quad (3.20)$$

Les fractions molaires, X_k , et les concentrations des espèces, C_k , peuvent être calculées grâce aux formules suivantes

$$X_k = \frac{W}{W_k} Y_k, \quad (3.21)$$

$$C_k = \frac{\rho_k}{W_k}. \quad (3.22)$$

L'implantation de la chimie complexe dans YALES2 a été très largement inspirée de Cantera [34]. De ce fait, le code est capable de lire des fichiers au format xml [3].

3.3.2 Thermodynamique

Les relations thermodynamiques sont généralement utilisées pour lier la composition, la température et l'enthalpie d'un mélange pour une pression et une composition données. L'hypothèse des gaz parfaits donne l'équation d'état suivante : $P = \rho r T$. Cette hypothèse est posée pour l'ensemble des calculs réalisés au cours des travaux de cette thèse. L'énergie est aussi indépendante la pression, ce qui permet une vision simplifiée des relations thermodynamiques. Les relations (3.23), (3.24) et (3.25) sont données à une pression de référence, ici égale à 1 atm. Pour des équations d'état de gaz réels, la dépendance en pression doit aussi être considérée.

Les propriétés thermodynamiques d'une espèce sont trouvées à l'aide d'approximations polynomiales (polynômes NASA) [71],

$$\frac{C_{p,k}(T, P^0)}{R} = a_{1,k} + a_{2,k}T + a_{3,k}T^2 + a_{4,k}T^3 + a_{5,k}T^4, \quad (3.23)$$

$$\frac{H_k^m(T, P^0)}{RT} = \frac{a_{6,k}}{T} + a_{1,k} + \frac{a_{2,k}}{2}T + \frac{a_{3,k}}{3}T^2 + \frac{a_{4,k}}{4}T^3 + \frac{a_{5,k}}{5}T^4, \quad (3.24)$$

$$\frac{S_k^m(T, P^0)}{R} = a_{7,k} + a_{1,k} \ln(T) + a_{2,k}T + \frac{a_{3,k}}{2}T^2 + \frac{a_{4,k}}{3}T^3 + \frac{a_{5,k}}{4}T^4, \quad (3.25)$$

où $C_{p,k}$, H_k^m et S_k^m correspondent respectivement à la capacité calorifique molaire à pression constante, à l'enthalpie molaire standard et à l'entropie molaire standard de l'espèce k .

Les coefficients $a_{i,k}$ sont dépendants du domaine de température dans lequel les expressions sont appliquées. Deux groupes de coefficients existent. Le premier groupe est utilisé pour décrire les propriétés des espèces dans le domaine des basses températures, c'est-à-dire entre T_{min} et T_{mid} tandis que le second est utilisé pour la gamme de température supérieure, de T_{mid} à T_{max} . Les trois valeurs T_{min} , T_{mid} et T_{max} sont a priori définies indépendamment pour chaque espèce. Les valeurs typiques sont $T_{min} = 300$ K, $T_{mid} = 1000$ K et $T_{max} = 5000$ K. Un ensemble de 14 coefficients par espèce est nécessaire. Ces coefficients sont fournis dans le fichier xml contenant le mécanisme. Il en est de même pour les valeurs T_{min} , T_{mid} et T_{max} .

Le calcul de ces polynômes à chaque pas de temps et à chaque noeud du maillage peut s'avérer coûteux en terme de temps de calcul. Une alternative consiste à tabuler les valeurs de ces polynômes sur de petits intervalles et de supposer que les capacités calorifiques molaires sont constantes sur ces intervalles. Cette option est disponible sous YALES2 mais une attention particulière doit être accordée à la consistance des variables entre elles. En effet, il est primordial que les définitions suivantes soient vérifiées

$$H_k^m(T, P^0) = \int_0^T C_{p,k}(\theta, P^0) d\theta, \quad (3.26)$$

$$S_k^m(T, P^0) = \int_0^T \frac{C_{p,k}(\theta, P^0)}{\theta} d\theta. \quad (3.27)$$

Les trois propriétés décrites par les équations (3.23), (3.24) et (3.25) sont des propriétés molaires, indiquées grâce à l'indice m . Les propriétés thermodynamiques spécifiques, c'est-à-dire par unité de masse, se retrouvent en divisant la quantité molaire correspondante par la masse molaire de l'espèce. Grâce à ces propriétés individuelles des espèces, il est possible de déterminer les propriétés molaires du mélange, à l'aide des lois de mélange,

$$C_p(T, P, X) = \sum_k^{N_{spe}} X_k C_{p,k}(T, P^0), \quad (3.28)$$

$$H^m(T, P, X) = \sum_k^{N_{spe}} X_k H_k^m(T, P^0), \quad (3.29)$$

$$S^m(T, P, X) = \sum_k^{N_{spe}} X_k \left(S_k^m(T, P^0) - R \ln \left(\frac{P}{P^0} \right) - \ln(X_k) \right). \quad (3.30)$$

Les deux premières lois correspondent à de simples propriétés additives mais la loi de mélange sur l'entropie est plus complexe. En effet, elle implique à la fois un terme de pression et un terme de mélange. De même, il faut noter que toutes les propriétés du mélange dépendent de X (vecteur des fractions molaires X_k du mélange).

Il est ensuite immédiat de calculer les variables c_p , H ou encore S à partir de la température et des densités partielles, pourvue une équation d'état donnée. L'opération inverse est toujours relativement délicate. En effet, pour retrouver la température à partir d'une enthalpie et d'un ensemble de densités partielles, lorsque toutes les densités partielles sont transportées, la résolution d'un polynôme de degré 5 est inéluctable. Cette résolution ne peut être réalisée que de manière approximative. Dans YALES2, le polynôme est résolu à l'aide d'un algorithme de Newton-Raphson. Sur la gamme de température étudiée, typiquement de 300 K à 3000 K, le polynôme est monotone. Par conséquent, la résolution du polynôme n'entraîne qu'un zéro. Au delà de ces températures, l'enthalpie est prolongée de manière linéaire.

3.3.3 Flux diffusifs

Une attention particulière doit être portée sur la diffusion du mélange. La diffusion est le résultat de mouvements microscopiques qui tendent à effacer les gradients macroscopiques présents dans un fluide, représentant un écart à la distribution de Maxwell (sous l'hypothèse d'un équilibre thermodynamique local). A partir de la théorie de la cinétique des gaz, plusieurs flux diffusifs sont mis en évidence lors de l'écriture de l'équation de transport des densités partielles, de la quantité de mouvement et de l'énergie totale [68]. Pour des fluides non-réactifs, ces équations s'écrivent de la manière suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} + \frac{\partial \mathcal{F}_{k,i}}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k = 0, \quad (3.31)$$

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial P}{\partial x_j} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_i} = 0, \quad (3.32)$$

$$\frac{\partial \rho h_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h_s) - \frac{DP}{Dt} - \dot{\omega}_T + \frac{\partial \mathcal{Q}_i}{\partial x_i} + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = 0. \quad (3.33)$$

Deux contributions macroscopiques apparaissent alors, causées par le mouvement moléculaire aléatoire : premièrement les termes de pression, qui sont isotropes et ne sont pas considérés comme diffusifs, et secondement les flux diffusifs \mathcal{F}_k , τ et \mathcal{Q} .

Ces trois flux sont donnés explicitement pour des fluides newtoniens par [36, 196, 197] :

$$\mathcal{F}_{k,i} = \rho_k V_{k,i}, \quad (3.34)$$

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) + \left(\kappa - \frac{2}{3} \mu \right) \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right), \quad (3.35)$$

$$\mathcal{Q}_i = \sum_k^{N_{spe}} h_{s,k} \mathcal{F}_{k,i} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + P \sum_k^{N_{spe}} \chi_k V_{k,i}, \quad (3.36)$$

avec :

$$V_{k,i} = - \sum_j^{N_{spe}} D_{kj} \left(d_{j,i} + \chi_j \frac{\partial (\ln T)}{\partial x_i} \right), \quad (3.37)$$

et :

$$d_{k,i} = \frac{\partial X_K}{\partial x_i} + (X_k - Y_k) \frac{\partial (\ln P)}{\partial x_i}. \quad (3.38)$$

Plusieurs coefficients sont ici évoqués. Tout d'abord μ et κ qui correspondent respectivement à la viscosité de cisaillement et à la viscosité volumique. λ indique la conductivité thermique.

Les rapports de diffusion thermique des espèces sont dénotés par χ_k . Le terme D_{kj} correspond toujours au coefficient de diffusion de l'espèce k dans l'espèce j .

Certains de ces termes possèdent une influence mineure sur le fluide. Afin de simplifier la résolution du système numérique, ils sont supposés nuls dans le solveur à densité variable de YALES2, présenté dans la section B.3. Ces termes sont :

- χ_k qui est associé aux effets Dufour et Soret ;
- le terme mettant en jeu κ qui a peu d'influence sur la structure du fluide pour les écoulements à faible nombre de Mach ;
- le terme $\frac{\partial(\ln P)}{\partial x_i}$ qui est présent dans la définition de \mathbf{d}_k est lui aussi négligé dans le formalisme Low-Mach. Sous l'hypothèse Low-Mach, la pression thermodynamique est constante en espace ;
- le terme de travail visqueux $\tau \cdot \mathbf{u}$ est aussi négligé sous l'approche Low-Mach, étant d'ordre M^2 .

Une hypothèse simplificatrice supplémentaire a été formulée : la diffusion de l'espèce k dépend uniquement de son propre gradient, avec un coefficient de diffusion moyenné pour le mélange, $\overline{D}_{k/m}$ (cf. section 3.3.7).

Avec l'ensemble de ces hypothèses, seuls les termes suivants doivent être résolus,

$$\mathcal{F}_{k,i} = -\rho_k \overline{D}_{k/m} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (3.39)$$

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}, \quad (3.40)$$

$$Q_i = \sum_k^{N_{spe}} h_{s,k} \mathcal{F}_{k,i} - \lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (3.41)$$

Les sections suivantes sont consacrées à la présentation des arguments théoriques nécessaires à l'obtention des coefficients de transport requis.

3.3.4 Résultats de la théorie de la cinétique des gaz

Afin d'étudier la cinétique des gaz, il est capital d'introduire certaines notations. Tout d'abord la constante de Boltzmann qui représente un facteur de proportionnalité liant la température d'un système à son énergie thermique,

$$k_B = 1.3806488 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}, \quad (3.42)$$

ensuite, le nombre d'Avogadro qui est défini comme le nombre d'entités présentes dans une mole. Plus précisément, il correspond au nombre d'atomes de carbone dans 12 grammes de l'isotope 12 du carbone,

$$\mathcal{N}_A = 6.02214129 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}. \quad (3.43)$$

La constante des gaz parfaits est le produit de ces deux premières constantes :

$$R = \mathcal{N}_A k_B = 8.3144621 \text{ J.K}^{-1} \cdot \text{mol}^{-1}. \quad (3.44)$$

La masse d'une molécule de l'espèce k est donnée par

$$\mathbf{m}_k = W_k / \mathcal{N}_A. \quad (3.45)$$

Deux types de molécules coexistent, les molécules polaires, par exemple H_2O et CO , et les molécules apolaires, par exemple CH_4 , O_2 , N_2 et CO_2 . Le premier type de molécule est caractérisé par son moment dipolaire η_i et le second par sa polarisabilité α_i .

De manière générale, l'interaction entre une paire de molécules est décrite par le potentiel de Lennard Jones,

$$\phi_{ij} = 4\epsilon_{ij} \left\{ \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right\}, \quad (3.46)$$

avec σ_{ij} le diamètre de collision, ϵ_{ij} la profondeur maximale du puits de potentiel et r la distance entre les molécules.

Les paramètres moléculaires associés à ce potentiel sont généralement calculés à partir des propriétés des espèces,

$$\mathbf{m}_{ij} = \frac{\mathbf{m}_i \mathbf{m}_j}{\mathbf{m}_i + \mathbf{m}_j}, \quad (3.47)$$

$$\eta_{ij} = \sqrt{\eta_i \eta_j}, \quad (3.48)$$

$$\epsilon_{ij} = f_\epsilon \sqrt{\epsilon_i \epsilon_j}, \quad (3.49)$$

$$\sigma_{ij} = f_\sigma \frac{1}{2} (\sigma_i + \sigma_j), \quad (3.50)$$

$$(3.51)$$

avec η_{ij} le moment dipolaire de la paire d'espèces, σ_i et σ_j les diamètres des molécules i et j et $f_\epsilon = \chi^2$ et $f_\sigma = \chi^{-\frac{1}{6}}$.

La fonction χ dépend des types de molécules qui se rencontrent,

$$\chi = \begin{cases} 1 & \text{si les deux molécules sont polaires ou apolaires} \\ 1 + \frac{1}{4} \alpha^* (\eta^*)^2 \sqrt{\frac{\epsilon_p}{\epsilon_{np}}} & \text{si une molécule est polaire et l'autre apolaire} \end{cases} \quad (3.52)$$

Les indices p et np font respectivement référence à la molécule polaire et à la molécule apolaire. La polarisabilité et le moment dipolaire réduits, α^* et η^* , sont calculés grâce à :

$$\alpha^* = \frac{\alpha}{\sigma_{np}^3}, \quad (3.53)$$

$$\eta^* = \frac{\eta}{\sqrt{\epsilon_p \sigma_p^3}}. \quad (3.54)$$

Finalement, le moment dipolaire réduit et adimensionnalisé de la paire d'espèces est obtenu,

$$\eta_{ij}^{**} = \frac{\eta_{ij}^2}{\epsilon_{ij} \sigma_{ij}^3}, \quad (3.55)$$

ainsi que sa température adimensionnée,

$$T_{ij}^* = \frac{k_B T}{\epsilon_{ij}}. \quad (3.56)$$

Les intégrales de collisions sont des intégrales le long du chemin collisionnel entre des paires de molécules, qui apparaissent naturellement dans les expressions des coefficients de transport. Mason et Monchick [120] calculent celles-ci à partir d'un potentiel de Stockmayer, extension du modèle de potentiel de Lennard Jones prenant en compte les moments dipolaires.

Les intégrales de collision sont ainsi des fonctions du moment dipolaire réduit adimensionnalisé et de la température réduite. Ces intégrales ont été évaluées puis rapportées sous forme

de tables. Dans le code YALES2, quatre types d'intégrales de collision ont été tabulées, bien que seulement deux soient utilisées en pratique dans l'état actuel du code,

$$\Omega^{(2,2)*}(T^*, \eta^{**}), \quad (3.57)$$

$$A^*(T^*, \eta^{**}) = \frac{\Omega^{(2,2)*}}{\Omega^{(1,1)*}}, \quad (3.58)$$

$$B^*(T^*, \eta^{**}) = \frac{5\Omega^{(1,2)*} - 4\Omega^{(1,3)*}}{\Omega^{(1,1)*}}, \quad (3.59)$$

$$C^*(T^*, \eta^{**}) = \frac{\Omega^{(1,2)*}}{\Omega^{(1,1)*}}. \quad (3.60)$$

Grâce à ces intégrales de collision et aux autres paramètres présentés précédemment, il est maintenant possible d'exprimer la viscosité, la conductivité et le coefficient de diffusion binaire liés à une espèce,

$$\mu_i(T) = \frac{5}{16} \frac{\sqrt{\Pi m_i k_B T}}{\pi \sigma_i^2 \Omega_{ii}^{(2,2)*}}, \quad (3.61)$$

$$\lambda_i(T) = \frac{\mu_i}{W_i} R \left(f_i^{trans} \mathbf{c}_{v,i}^{trans} + f_i^{rot} \mathbf{c}_{v,i}^{rot} + f_i^{vib} \mathbf{c}_{v,i}^{vib} \right), \quad (3.62)$$

$$p\mathcal{D}_{ij}(T) = \frac{3}{16} \frac{\sqrt{2\pi k_B^3 T^3 / m_{ij}}}{\pi \sigma_{ij}^2 \Omega_{ij}^{(1,1)*}}. \quad (3.63)$$

L'équation (3.62) a été établie par Warnatz comme extension de la formule d'Eucken [143]. Dans cette formule, de nombreux coefficients apparaissent,

$$\mathbf{c}_{v,i}^{trans} = \frac{3}{2}, \quad (3.64)$$

$$\mathbf{c}_{v,i}^{rot} = \begin{cases} 0, & \text{pour les atomes} \\ 1, & \text{pour les molécules linéaires} \\ \frac{3}{2}, & \text{pour les autres molécules} \end{cases} \quad (3.65)$$

$$\mathbf{c}_{v,i}^{vib} = \mathbf{c}_{v,i} - \mathbf{c}_{v,i}^{trans} - \mathbf{c}_{v,i}^{rot} \text{ avec } \mathbf{c}_{v,i} = \frac{C_{p,i}^m}{\mathcal{N}_A} - 1, \quad (3.66)$$

$$f_i^{vib} = \frac{W_i}{RT} \frac{p\mathcal{D}_{ii}}{\mu_i}, \quad (3.67)$$

$$A_i = \frac{5}{2} - f_i^{vib}, \quad (3.68)$$

$$B_i = \zeta_i + \frac{2}{\pi} \left(\frac{5}{3} \mathbf{c}_{v,i}^{rot} + f_i^{vib} \right), \quad (3.69)$$

$$C_i = \frac{2}{\pi} \frac{A_i}{B_i}, \quad (3.70)$$

$$f_i^{rot} = f_i^{vib} (1 + C_i), \quad (3.71)$$

$$f_i^{trans} = \frac{5}{2} \left(1 - C_i \frac{\mathbf{c}_{v,i}^{rot}}{\mathbf{c}_{v,i}^{trans}} \right); \quad (3.72)$$

où ζ_i est le nombre de collision lié à la relaxation de l'énergie rotationnelle.

La géométrie des molécules doit être fournie dans le fichier contenant la description des espèces afin de pouvoir calculer la partie rotationnelle de la capacité calorifique.

3.3.5 Calcul de la viscosité de cisaillement du mélange

La viscosité de cisaillement d'un mélange est calculée à partir d'une loi de mélange, connue sous le nom de formule de Wilke [18],

$$\mu = \sum_{i \in \mathcal{S}} \frac{X_i \mu_i}{\sum_{j \in \mathcal{S}} X_j \Phi_{ij}}, \quad (3.73)$$

où les poids Φ_{ij} sont donnés par :

$$\Phi_{ij} = \frac{1}{\sqrt{8}} \frac{1}{\sqrt{1 + W_i/W_j}} \left(1 + \sqrt{\frac{\mu_i}{\mu_j}} \left(\frac{W_i}{W_j} \right)^{1/4} \right). \quad (3.74)$$

3.3.6 Calcul de la conductivité thermique du mélange

La conductivité thermique du mélange est calculée grâce à une autre loi de mélange, donnée par Brocaw [28] et Mathur, Tondon et Saxena [122],

$$\lambda = \frac{1}{2} (\lambda_{\parallel} + \lambda_{\perp}), \quad (3.75)$$

avec $\lambda_{\parallel} = \sum_i^{N_{spe}} X_i \lambda_i$ et $\lambda_{\perp}^{-1} = \sum_i^{N_{spe}} X_i \lambda_i^{-1}$.

3.3.7 Calcul des coefficients de diffusion de mélange moyennés

L'équation (3.16) montre que chaque espèce possède une vitesse de diffusion \mathbf{V}_k . Sans les hypothèses simplificatrices de la section 3.3.3, cette vitesse peut s'obtenir de manière précise en résolvant le système suivant [202], où les inconnues sont les $V_{k,i}$:

$$\frac{\partial X_k}{\partial x_i} = \sum_{j=1}^{N_{spe}} \frac{X_k X_j}{D_{kj}} (V_{j,i} - V_{k,i}) + (Y_k - X_k) \frac{\partial(\ln P)}{\partial x_i} + \frac{\rho}{P} \sum_{j=1}^{N_{spe}} Y_k Y_j (f_k - f_j), \quad (3.76)$$

où f_j représente les forces volumiques de l'espèce j .

Afin de trouver l'ensemble des coefficients, il faudrait résoudre trois systèmes linéaires de taille $(N_{spe})^2$, à chaque point et à chaque instant. Ern et Giovangigli ont montré que cela était difficile et extrêmement coûteux à réaliser d'un point de vue algorithmique [53].

Le choix implanté dans YALES2 porte donc sur l'approximation de Hirschelder-Curtiss [82]. Cette approximation est considérée comme la meilleure approximation du premier ordre selon Ern et Giovangigli [53, 68],

$$V_{k,i} X_k = -\bar{D}_{k/m} \frac{\partial X_k}{\partial x_i}, \quad (3.77)$$

avec

$$\bar{D}_{k/m} = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}}. \quad (3.78)$$

Le coefficient $\bar{D}_{k/m}$ n'est plus un coefficient binaire mais un coefficient de diffusion équivalent de l'espèce k dans le reste du mélange. L'introduction de cette approximation a malgré tout un inconvénient : la masse n'est pas conservée. Une nouvelle vitesse, nommée vitesse de correction \mathbf{V}_c est introduite afin de pouvoir conserver la masse totale,

$$V_{c,i} = Y_k \bar{D}_{k/m} \frac{\partial(\ln X_k)}{\partial x_i}, \quad (3.79)$$

La vitesse de diffusion de l'équation (3.77) est légèrement modifiée,

$$V'_{k,i} = -\bar{D}_{k/m} \frac{\partial(\ln X_k)}{\partial x_i} + V_{c,i}, \quad (3.80)$$

de telle sorte que l'on ait bien,

$$\sum_{k=1}^{N_{spe}} Y_k V'_{k,i} = 0. \quad (3.81)$$

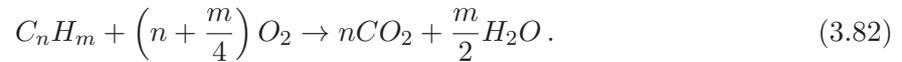
3.4 Chimie détaillée

Les différentes réactions entrant en jeu dans le mécanisme chimique régissant la combustion sont ici expliquées. Les définitions présentées dans cette section permettent une résolution précise des termes sources chimiques présents dans les équations de conservation des espèces, équations 3.6. Cette résolution s'avère utile pour les calculs effectués en chimie détaillée. Des méthodes simplificatrices permettant de modéliser la chimie seront aussi utilisées dans les travaux effectués au cours de cette thèse. Celles-ci seront énumérées dans la section 3.5.

La cinétique chimique étant un domaine vaste, le lecteur est amené à se référer à la bibliographie pour plus de précisions [108, 103, 149].

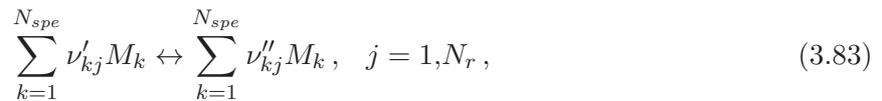
3.4.1 Réaction globale

Considérons l'équation de bilan globale pour la combustion d'un hydrocarbure dans l'air,



Dans la réalité, une telle réaction est impossible. Les phénomènes chimiques se produisant lors d'une combustion sont bien plus complexes.

En effet, la combustion ne se déroule pas en une seule étape, réversible ou non. Elle se déploie en une multitude de réactions N_r entraînant un grand nombre d'espèces intermédiaires N_{spe} ,



où M_k est le symbole chimique de l'espèce k . Les symboles ν'_{kj} et ν''_{kj} correspondent respectivement aux coefficients stoechiométriques molaires direct et inverse de l'espèce k dans la réaction j .

L'équation (3.83) constitue la manière la plus générale d'écrire un schéma réactionnel. Toutefois, toutes les espèces n'interviennent pas dans toutes les réactions. Si une espèce n'est pas présente dans une réaction, ses coefficients stoechiométriques sont nuls. Pour une réaction donnée, les espèces possédant un coefficient stoechiométrique direct non nul sont appelées les réactifs et celles possédant un coefficient indirect non nul les produits. Une espèce peut apparaître à la fois dans les réactifs et les produits, il s'agit d'un partenaire non réactif ou inerte. De tels partenaires ne sont pas affectés par la réaction mais leur concentration peut influencer le taux de réaction, par un effet de dilution.

Plusieurs types de réactions chimiques se distinguent, et la manière de calculer leur taux de réaction en dépend. Les différents types sont listés au paragraphe suivant.

3.4.2 Classification des réactions chimiques

Une première classification des réactions chimiques est faite en fonction de la nature de leurs coefficients stoechiométriques. Lorsque ceux-ci sont entiers, que la réaction implique au maximum quatre espèces et qu'elle se déroule sans faire intervenir d'intermédiaire réactionnel, elle est qualifiée de réaction élémentaire. Une telle réaction se produit en une étape. Toutes les autres réactions, impliquant plus d'espèces ou faisant intervenir des coefficients stoechiométriques non-entiers sont dites non-élémentaires.

Le premier type de réaction est le plus simple. Il s'agit de la réaction irréversible. Cette réaction, comme son nom l'indique, s'effectue uniquement dans un sens. Les réactifs se transforment en produits mais la composition des produits rend la réaction inverse impossible. Physiquement, ce type de réaction ne peut pas exister. Cependant, dues aux propriétés thermodynamiques des réactifs et des produits, la réaction inverse est considérée comme négligeable pour des conditions de flammes ordinaires.

Le second type de réaction est la réaction réversible. Elle s'effectue dans les deux sens, de réactifs vers produits et de produits vers réactifs.

Ces deux types de réactions étant fortement semblables, le calcul de leur taux de réaction, Q_j , s'accomplit de la même manière,

$$Q_j = \underbrace{k_{fj} \prod_{k=1}^{N_{spe}} C_k^{\nu'_{kj}}}_{q_j^f} - \underbrace{k_{rj} \prod_{k=1}^{N_{spe}} C_k^{\nu''_{kj}}}_{q_j^r}, \quad (3.84)$$

avec k_{fj} et k_{rj} les constantes de vitesse directe et indirecte de la réaction j et C_k la concentration molaire de l'espèce k .

Le taux de réaction, Q_j , est la somme d'un taux de réaction direct q_j^f et d'un taux de réaction indirect q_j^r .

Trouver une expression pour k_{fj} représente un problème central pour la modélisation de la combustion. En général, une loi dite d'Arrhenius est adoptée,

$$k_{fj} = A_j T^{\beta_j} \exp\left(-\frac{E_j}{RT}\right), \quad (3.85)$$

avec A_j la constante pré-exponentielle, β_j l'exposant de température et E_j l'énergie d'activation de la réaction.

La constante d'équilibre de la réaction j , $K_{eq,j}$, permet de trouver la valeur de k_{rj} grâce à la relation $k_{rj} = k_{fj}/K_{eq,j}$. La minimisation de l'enthalpie libre, $G = H - TS$, permet d'obtenir l'état d'équilibre chimique, et ainsi de déterminer $K_{eq,j}$ selon,

$$K_{eq,j}(T) = \left(\frac{P^0}{RT}\right)^{\sum_{k=1}^{N_{spe}} \nu_{jk}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{R} - \frac{\Delta H_j^0}{RT}\right), \quad (3.86)$$

avec ΔH_j^0 et ΔS_j^0 les variations d'enthalpie sensible plus chimique et d'entropie au cours de la réaction j . Ici P^0 équivaut à la pression de référence, utilisée pour la détermination des propriétés thermodynamiques des espèces, présentées dans la section 3.3.2. Le coefficient ν_{jk} est égal à : $\nu''_{jk} - \nu'_{jk}$.

Le troisième type de réaction est celui des réactions faisant intervenir un troisième corps. En général, il s'agit de réactions de recombinaison du type $A + B \rightarrow AB^*$ et $AB^* + M \rightarrow C + M$. La réaction s'écrit de manière plus générale :



où M est appelé partenaire de collision. Son rôle consiste à récupérer l'excès d'énergie de l'espèce transitionnelle afin de la stabiliser.

Lorsqu'un troisième corps est nécessaire, la concentration efficace du mélange pour la réaction j doit apparaître dans l'expression du taux de réaction. Un facteur est ajouté à l'équation (3.84),

$$Q_j = \left(\sum_{k=1}^{N_{spe}} \alpha_{ki} C_k \right) \left(k_{fj} \prod_{k=1}^{N_{spe}} C_k^{\nu'_{kj}} - k_{rj} \prod_{k=1}^{N_{spe}} C_k^{\nu''_{kj}} \right), \quad (3.88)$$

où α est un facteur dépendant de l'efficacité de l'espèce en tant que troisième corps de la réaction i .

Le dernier type de réaction est celui des réactions dépendantes de la pression, dites de "Fall-Off". Il s'agit de réactions où la prise en compte du troisième corps dans l'expression de la constante de vitesse est uniquement nécessaire dans la zone de faible concentration. Lorsque le mélange est suffisamment concentré, il n'y a pas d'accumulation de l'espèce activée, AB^* , et la constante de vitesse devient indépendante du troisième corps intervenant dans la réaction. Afin de les distinguer des réactions avec troisième corps, le partenaire moléculaire est mis entre parenthèses,



La constante de vitesse dépend de la concentration $[M]$ et donc de la pression totale P . Lorsque la réaction se fait dans le domaine des faibles concentrations (basse pression), le taux de réaction des réactions troisième corps de l'équation (3.88) est applicable. De même, dans le domaine des fortes concentrations (haute pression), celui des réactions réversibles, équation (3.84) est utilisé. La difficulté réside dans la formulation du taux de réaction dans la zone de transition. Deux méthodes sont ici proposées.

Dans les deux cas, les expressions des constantes de vitesse pour les limites basse pression k_0 et haute pression k_∞ sont données sous la forme Arrhenius,

$$k_0 = A_0 T^{\beta_0} \exp(-E_0/RT), \quad (3.90)$$

$$k_\infty = A_\infty T^{\beta_\infty} \exp(-E_\infty/RT). \quad (3.91)$$

D'une manière générale, le taux direct de la réaction s'écrit sous la forme :

$$k_f(T, P_r) = k_\infty \left(\frac{P_r}{1 + P_r} \right) F, \quad (3.92)$$

où F correspond à un facteur correctif.

La pression réduite, P_r , est définie par :

$$P_r = \frac{k_0 [M]}{k_\infty}, \quad (3.93)$$

avec $[M]$ la concentration du mélange caractérisée par : $[M] = \sum_{k=1}^{N_{spe}} C_k$.

Le facteur correctif F est égal à 1 sous sa forme la plus simple proposée par Lindemann [109]. Dans la formulation de Troe [67] il vaut :

$$\log F = \left[1 + \left(\frac{\log P_r + c}{n - d(\log P_r + c)} \right)^2 \right]^{-1} \log F'. \quad (3.94)$$

Des constantes apparaissent dans l'équation (3.94),

$$c = -0.4 - 0.67 \log F', \quad (3.95)$$

$$n = -0.75 - 1.27 \log F', \quad (3.96)$$

$$d = 0.14, \quad (3.97)$$

$$F' = (1 - a) \exp(-T/T^{***}) + a \exp(-T/T^*) + \exp(-T^{**}/T), \quad (3.98)$$

les quatre paramètres a , T^* , T^{**} et T^{***} doivent être définis dans le mécanisme.

L'ensemble des réactions permet ainsi la détermination du taux de réaction de l'espèce k ,

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^{N_r} \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^{N_r} \nu_{kj} Q_j. \quad (3.99)$$

La conservation de la masse totale et atomique donne la relation suivante :

$$\sum_{k=1}^{N_{spe}} \dot{\omega}_k = 0. \quad (3.100)$$

Le fait de calculer le terme source de chaque espèce en chaque point et à chaque itération se révèle très vite extrêmement coûteux. Par conséquent, cette technique est très peu utilisée dans les codes de calcul. Différentes techniques ont été développées pour modéliser la cinétique chimique afin d'améliorer le temps de calcul. Les méthodes de schémas globaux et de chimie tabulée seront explicitées dans la section 3.5.

3.4.3 Raideur d'un système chimique

La raideur d'un système différentiel est un problème rencontré lors de la résolution numérique du système d'équations aux dérivées partielles régissant le fluide réactif. En effet, de nombreux processus physico-chimique sont mis en jeu et ceux-ci impliquent une multitude d'échelles de temps. Le calcul de l'ensemble des termes sources des espèces fait déjà à lui seul intervenir plusieurs temps caractéristiques. Le temps d'intégration représente la principale difficulté numérique pour traiter la chimie. Cela est d'autant plus vrai lorsque l'évaluation des termes sources est effectuée en chaque noeud, comme cela est le cas dans YALES2.

Le pas de temps limitant la résolution du système chimique n'est pas corrélé avec les échelles de temps caractéristiques du fluide. Le pas de temps chimique peut être supérieur au pas de temps convectif, pour la chimie du NO par exemple. Dans ce cas, la difficulté numérique est moindre. Tous les pas de temps ne sont pas égaux mais ne limitent pas l'ensemble du calcul. Malheureusement, ce cas est rare et la situation inverse, où le pas de temps chimique est inférieur de plusieurs ordres de grandeur au pas de temps convectif, est généralement rencontrée.

Une étude simplifiée permettant de déterminer les temps caractéristiques chimiques est présentée afin de mieux comprendre le problème.

Le cas simplifié du réacteur $0D$ est ici traité. Le système est supposé adiabatique et à pression constante. Il s'agit ici d'une analyse classique [35, 111]. De ce fait, l'espace des phases associé au système chimique évoluant dans le temps est réduit à l'espace de coordonnées $\Phi = (\rho Y_1, \dots, \rho Y_{N_s}, \rho H, P)$.

Ce système évolue de manière temporelle,

$$\frac{d\Phi}{dt} = \hat{\Omega}(\Phi, t), \quad (3.101)$$

avec $\frac{d\Phi}{dt}$ la dérivée de Φ . De ce fait, $\dot{\Omega} = (\dot{\omega}_{\rho Y_1}, \dots, \dot{\omega}_{\rho Y_{N_s}}, 0, 0)$ représente le vecteur des termes sources chimiques.

La fonction $\dot{\Omega}(\Phi) : \mathbb{R}^{N_s+2} \mapsto \mathbb{R}^{N_s+2}$ est donnée par le schéma cinétique. De manière générale, elle est non linéaire et il n'est pas possible de réaliser une étude analytique directe sur un tel système. Une stratégie possible consiste à développer $\dot{\Omega}(\Phi)$ en série de Taylor autour d'un point $\Phi(t_0)$,

$$\dot{\Omega}(\Phi(t)) = \dot{\Omega}(\Phi(t_0)) + \frac{\partial \dot{\Omega}}{\partial \Phi}(\Phi(t_0)) \cdot (\Phi(t) - \Phi(t_0)) + \mathcal{O}\left((\Phi(t) - \Phi(t_0))^2\right). \quad (3.102)$$

Afin de simplifier l'écriture du système, de nouvelles notations sont introduites :

$$\Phi_0 = \Phi(t_0), \quad (3.103)$$

$$\dot{\Omega}_0 = \dot{\Omega}(\Phi_0), \quad (3.104)$$

$$J_0 = \frac{\partial \dot{\Omega}}{\partial \Phi}(\Phi_0), \quad (3.105)$$

$$\Phi = \Phi(t). \quad (3.106)$$

Le nouveau système linéarisé peut s'écrire :

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi}{dt} &= \dot{\Omega}_0 + J_0 \cdot (\Phi - \Phi_0) + \mathcal{O}\left((\Phi - \Phi_0)^2\right) \\ &= J_0 \cdot \left(\Phi - \left(\Phi_0 - J_0^{-1} \cdot \dot{\Omega}_0\right)\right) + \mathcal{O}\left((\Phi(t) - \Phi(t_0))^2\right). \end{aligned} \quad (3.107)$$

En omettant les termes d'ordre supérieur ou égal à 2, ce système 3.107 possède une solution analytique,

$$\Phi(t_0 + \Delta t) = \left(\Phi_0 - J_0^{-1} \cdot \dot{\Omega}_0\right) + e^{J_0 \Delta t} \cdot \left(J_0^{-1} \cdot \dot{\Omega}_0\right), \quad (3.108)$$

valable au premier ordre en $\dot{\Omega}_0 \Delta t$.

Pour une résolution temporelle au premier ordre, l'évolution du système est pilotée par le terme $e^{J_0 \Delta t}$.

La matrice J_0 introduite dans l'équation (3.105) désigne la matrice jacobienne des termes sources, qui peut se diagonaliser (dans le cas général) selon,

$$J_0 = P \cdot \Lambda \cdot P^{-1}, \quad (3.109)$$

avec $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_s+2})$, la matrice complexe diagonale formée par les valeurs propres λ_j . La matrice de passage P est définie par les vecteurs propres de la matrice J_0 .

Les $N_s + 1$ valeurs propres $(\lambda_1, \dots, \lambda_{N_s+2})$ décrivent les modes propres du système. Elles peuvent être réelles ou complexes. Dans ce dernier cas, elles sont liées par paire de valeurs propres complexes conjuguées, $(\lambda_j = a_j + \mathbf{i}b_j, \lambda_j^* = a_j - \mathbf{i}b_j)$. De plus, il est important de noter que le système possède $N_s + 2 - N_e - 2$ degrés de liberté [111], où N_e représente le nombre d'éléments présents dans le mécanisme. En effet, certaines des valeurs propres sont strictement égales à 0 du fait de la conservation des atomes, de l'enthalpie et de l'équation en pression. Pour plus de simplicité sur cette réflexion, les valeurs propres égales à 0 sont omises dans la suite du développement.

Les notations suivantes sont adoptées :

$$\lambda_{\max} = \max_{\lambda \neq 0} \|\lambda\|, \quad (3.110)$$

$$\lambda_{\min} = \min_{\lambda \neq 0} \|\lambda\|. \quad (3.111)$$

Ces notations permettent de déterminer le rapport entre la plus grande et la plus petite valeur propre (en valeurs absolues) non nulle de la matrice jacobienne J_0 ,

$$\sigma = \frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}. \quad (3.112)$$

Plus le rapport σ est grand, plus le problème rencontré est raide. On peut estimer de manière grossière que la valeur du rayon correspond au nombre d'itérations nécessaires à la résolution *explicite* du système.

De plus, $\tau_k = \lambda_k^{-1}$ représente le pas de temps caractéristique associé au $k^{\text{ème}}$ vecteur propre. Pour des chimies hydrocarbonées se produisant dans des conditions ordinaires, $\tau_{\min} = \lambda_{\max}^{-1}$ est de l'ordre de $10^{-12} - 10^{-9} \text{ s}^{-1}$. Cette valeur diffère de plusieurs ordres de grandeur par rapport aux pas de temps caractéristiques associés aux phénomènes convectifs ou diffusifs.

L'utilisation d'un schéma explicite pour l'intégration des termes sources requiert obligatoirement un pas de temps de l'ordre de τ_{\min} afin de garantir une stabilité numérique. Il s'agit là d'une contrainte forte, qui explique pourquoi cette méthode n'est pas la plus adaptée.

Afin contourner ce problème, des bibliothèques capables de résoudre des systèmes d'équations différentielles ordinaires (ODE) avec des méthodes implicites multi-pas dédiées à l'intégration temporelle de problèmes raides ont été développées.

Quatre de ces bibliothèques ont été couplées avec YALES2 :

- LSODE
- VODPK
- CVODE
- RADAU5

Ces quatre bibliothèques sont basées sur le même principe : un ordre et un pas de temps variables suivant une méthode BDF (*backward differentiation formula*) avec contrôle de l'erreur. Ces méthodes se différencient par plusieurs détails tels que le langage d'implantation et les solveurs linéaires utilisés pour résoudre les systèmes.

Une fois le vecteur solution obtenu à partir de ces bibliothèques, le terme source se détermine par une approximation du premier ordre en temps dans YALES2,

$$\dot{\Omega} = \frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\Delta t}. \quad (3.113)$$

3.4.4 Variables caractéristiques d'une flamme

Avant d'introduire les variables permettant de caractériser une flamme, il est nécessaire de définir le rapport stoechiométrique massique,

$$s = \left(\frac{Y_O}{Y_F} \right)_{st} = \frac{\nu_O M_O}{\nu_F M_F}, \quad (3.114)$$

où ν et Y correspondent respectivement au coefficient molaire stoechiométrique et à la fraction massique locale. Les indices F et O font respectivement référence au carburant et à l'oxydant.

3.4.4.1 Richesse et fraction de mélange

Le ratio défini précédemment permet d'introduire la première grandeur caractéristique d'une flamme : la richesse. La richesse d'une flamme est un nombre adimensionnel caractérisant la

quantité de carburant présente dans le mélange par rapport à la quantité de carburant nécessaire à une combustion stoechiométrique,

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} = \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right) / \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right)_{st}. \quad (3.115)$$

Cette variable est fortement liée à la seconde variable, nommée fraction de mélange et notée Z , qui fournit une indication sur la composition du mélange. Elle dénote le rapport local entre le carburant F et l'oxydant O . Pour une chimie à une étape avec l'hypothèse de nombre de Lewis unitaire, la fraction de mélange s'écrit :

$$Z = \frac{sY_F - Y_O + Y_{O,0}}{sY_{F,0} + Y_{O,0}}, \quad (3.116)$$

où $Y_{F,0}$ et $Y_{O,0}$ représentent les fractions massiques de carburant et d'oxydant dans les flux initiaux.

Cette définition a plus particulièrement un sens pour les flammes de diffusion mais se révèle très utile pour caractériser une stratification de mélange. Son intérêt est tout de même moindre pour les flammes parfaitement prémélangées, pour lesquelles Z est constant.

Elle est normalisée ici de façon à valoir 0 dans l'oxydant et 1 dans le fuel. Son lien avec la richesse s'obtient en manipulant l'équation (3.116),

$$Z = \frac{\phi \frac{Y_F}{Y_{F,0}} - \frac{Y_O}{Y_{O,0}} + 1}{\phi + 1}. \quad (3.117)$$

Afin d'obtenir des équations pouvant être insérées dans un code de calcul résolvant une chimie détaillée, ces variables vont maintenant être définies grâce à la conservation des atomes.

Les réactions chimiques se produisant lors d'une combustion engendrent une évolution temporelle des fractions massiques des différentes espèces présentes au sein du mélange. Cependant, la masse des éléments atomiques est conservée ce qui s'avère très utile pour introduire de nouvelles définitions des variables décrivant la combustion, présentées dans la section précédente. Ces définitions, basées sur la conservation des atomes, sont particulièrement bien adaptées à la combustion d'un hydrocarbure avec un comburant oxygéné (air ou oxygène pur).

Soit a_{ij} le nombre d'atomes de l'élément j (exposant e pour élément) dans une espèce i (exposant s pour *species*) et W_j^e la masse molaire de cet élément. En notant m_i^s la masse et W_i^s la masse molaire de l'espèce i , alors la masse d'atome j au sein du domaine étudié s'écrit :

$$m_j^e = \sum_{i=1}^n \frac{a_{ij} W_j^e}{W_i^s} m_i^s. \quad (3.118)$$

La masse totale du mélange est notée m . Connaissant la masse de l'élément j dans le mélange, il est possible de déterminer sa fraction massique, Z_j ,

$$Z_j = \frac{m_j^e}{m} = \sum_{i=1}^n \frac{a_{ij} W_j^e}{W_i^s} Y_i, \quad (3.119)$$

avec Y_i la fraction massique de l'espèce i .

Afin de définir la fraction de mélange, nous nous intéressons plus particulièrement aux fractions massique de carbone (C), d'hydrogène (H) et d'oxygène (O), qui sont à la base de la combustion d'un hydrocarbure. En reprenant l'équation (3.82) faisant référence à la réaction globale stoechiométrique d'un hydrocarbure $C_m H_n$, les relations entre les fractions massiques d'atomes sont obtenues,

$$\frac{Z_C}{m W_C^e} = \frac{Z_H}{n W_H^e} = \frac{Y_{F,u}}{W_F}, \quad Z_O = Y_{O_{2,u}}, \quad (3.120)$$

où $Y_{F,u}$ et $Y_{O_2,u}$ font référence aux fractions massiques locales de carburant et d'oxygène dans le mélange imbrûlé.

Soit β la fonction de couplage définie par :

$$\beta = \frac{Z_C}{mW_C^e} + \frac{Z_H}{nW_H^e} - 2\frac{Z_O}{\left(n + \frac{m}{4}\right)W_{O_2}}. \quad (3.121)$$

Lors d'une combustion stoechiométrique, cette fonction est égale à zéro. Cette définition correspond à la définition originale d'un scalaire conservé proposée par Burke et Schumann [29]. Il est possible de normaliser la fonction entre 0 et 1,

$$Z = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2}, \quad (3.122)$$

où les indices 1 et 2 sont respectivement reliés au jet de carburant et au jet d'oxydant.

La fraction de mélange définie par Bilger [16] est ainsi obtenue,

$$Z = \frac{Z_C/(mW_C^e) + Z_H/(nW_H^e) + 2(Y_{O_2,2} - Z_O)/(\nu_O W_{O_2})}{Z_{C,0}/(mW_C^e) + Z_{H,0}/(nW_H^e) + 2Y_{O_2,2}/(\nu_O W_{O_2})}, \quad (3.123)$$

où $Y_{O_2,2}$ correspond à la fraction massique d'oxygène contenue dans le jet d'oxydant.

Cette définition présente l'avantage de pouvoir être utilisée pour différents types de modélisation de la chimie dans lesquels la diffusion différentielle est bien prise en considération.

La richesse du mélange peut aussi être définie par les fractions massique des atomes,

$$\varphi = \frac{2\frac{Z_C}{W_C^e} + 0.5\frac{Z_H}{W_H^e}}{\frac{Z_O}{W_O^e}}. \quad (3.124)$$

3.4.4.2 Variable de progrès

La dernière variable est la variable de progrès. Cette variable adimensionnée permet de caractériser l'avancement de la réaction. Elle est en général définie grâce à des grandeurs telles que la température ou une somme de fractions massiques,

$$C = \frac{T - T_u}{T_b - T_u}. \quad (3.125)$$

La définition basée sur la température n'est pas adaptée lorsque des pertes thermiques sont présentes. De plus, il est indispensable que cette variable évolue de manière monotone, afin qu'une valeur de C corresponde à un unique état thermochimique. Lorsqu'elle est exprimée en fractions massiques, elle est souvent basée sur CO et CO_2 ,

$$C = \frac{Y_{CO} + Y_{CO_2}}{Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq}}, \quad (3.126)$$

où l'indice *eq* fait référence aux grandeurs à l'équilibre chimique. L'évolution de cette variable est donc dépendante de la fraction de mélange.

Tout comme pour les variables précédentes, il est possible de caractériser la variable de progrès grâce à la conservation des atomes. Poinso *et al.* [150] font la proposition suivante :

$$C = 1.0 - \frac{Y_F}{Z_C + Z_H}. \quad (3.127)$$

Cette définition est valable uniquement pour les hydrocarbures non oxygénés. Dans ce cas, la relation $Z_C + Z_H = Y_F$ est vérifiée dans les gaz frais, ce qui implique une valeur nulle de la

variable de progrès. Dans les gaz brûlés, si le carburant est entièrement consommé, sa fraction massique est nulle et la variable de progrès prend la valeur $C = 1$. Cette dernière condition est toujours valable pour des mélanges pauvres ou stoechiométriques. Cependant, si le mélange est riche, des fractions de carburant peuvent être présentes au sein des gaz brûlés. Bien que des mélanges riches soient étudiés au cours de cette thèse, les schémas réactionnels utilisés montrent que le carburant n'est plus présent à la fin de la combustion. Cette définition est donc appliquée dans les études sur la stratification en gaz frais. Pour les cas comportant des dilutions en gaz brûlés, elle ne peut plus être utilisée.

3.5 Modélisation de la chimie

Les sections précédentes rendent compte de la complexité d'un mécanisme chimique. Le système d'équation régissant un fluide réactif comporte le transport de chaque espèce, et le calcul de tous les termes sources. Résoudre un tel système demande un temps de calcul extrêmement important et ne peut s'appliquer qu'à des configurations académiques pour un nombre de points de discrétisation réduit. Différentes méthodes ont été proposées afin de simplifier le traitement de la cinétique chimique dans un code de calcul.

3.5.1 Schéma globaux

Nous avons vu qu'un schéma global était le nom donné à une combustion représentée par une chimie à une seule étape. Ce nom s'étend généralement à des schémas comportant relativement peu d'étapes. De tels schémas reposent principalement sur deux hypothèses :

- l'état quasi-stationnaire (QSSA) : des espèces intermédiaires ou des radicaux sont supposés atteindre l'état d'équilibre très rapidement. Leur taux de consommation et de production sont en équilibre. La concentration de telles espèces reste constante et les espèces sont ainsi retirées du schéma réactionnel ;
- l'équilibre partiel (PEA) : des réactions élémentaires sont supposées avoir atteint l'état d'équilibre. Les taux d'avancement direct et inverse de la réaction possèdent le même ordre de grandeur. On considère que la réaction joue un rôle mineur dans le schéma réactionnel. La réaction est alors retirée de celui-ci.

Peters [139] propose une méthode itérative fondée sur ces deux hypothèses. Une telle méthode requiert de très bonnes connaissances et compétences en cinétique chimique.

Les schémas ainsi obtenus doivent être maniés avec précaution. Leur plage de validité est limitée, puisque certaines des hypothèses effectuées ne couvrent pas l'ensemble des domaines de pression, de richesse et de température.

Plusieurs études ont aussi porté sur l'adaptation du calcul du terme source pour l'obtention d'un schéma cinétique à une étape permettant de prédire correctement certaines propriétés de la flamme. Ferziger et Echehki [55] proposent de considérer le taux de réaction comme une fonction triangulaire, dépendante de la température réduite. D'autres méthodes se basant sur l'adaptation des constantes d'Arrhenius ont aussi été développées [33, 181]. Ces méthodes ne nécessitent pas une grande connaissance de la cinétique chimique, mais une partie des propriétés du schéma est négligée.

3.5.2 Chimie tabulée

Afin de conserver les schémas complets, des méthodes de tabulation ont été développées. Un aperçu non exhaustif de ces méthodes est donné ci-après. La méthode FPI utilisée au cours de

cette thèse sera un peu plus détaillée.

3.5.2.1 Intrinsic Low Dimensional Manifold

Nous avons vu que la réduction des schémas cinétiques était principalement liée aux temps caractéristiques des réactions et des espèces. Maas et Pope [111] suggèrent une méthode permettant de tester puis trier les temps caractéristiques des espèces. Ils remarquent en effet que les évolutions des fractions massiques suivent un ensemble de trajectoires, figure 3.1, valables pour un sous-espace de composition (chaque direction de l'espace de composition est liée à une concentration d'espèce).

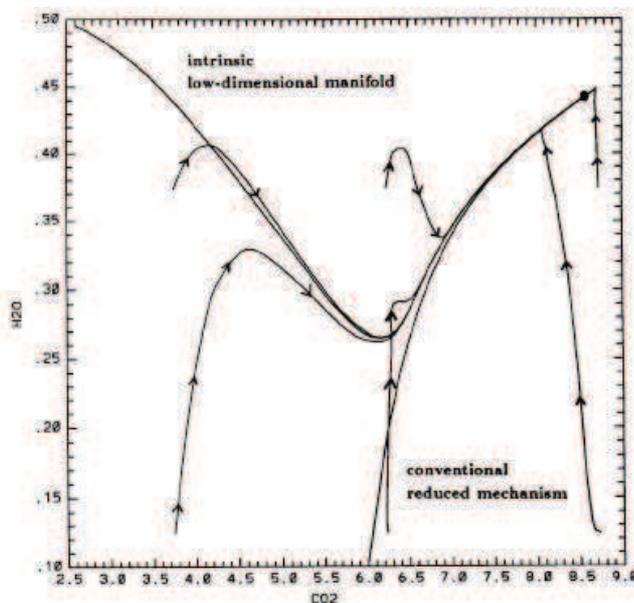


Fig 3.1 – Exemple d’une variété ILDM pour une combustion $CO/H_2/air$, et de différentes trajectoires chimiques dans l’espace H_2O, CO_2 . Extrait de Maas et Pope [111].

La détermination de ces trajectoires s’effectue à l’aide du mécanisme détaillé. Afin d’évaluer ces trajectoires, le système chimique est posé sous sa forme mathématique. Les valeurs propres et les vecteurs propres de la matrice jacobienne sont ensuite recherchées afin de déterminer les modes lents et les modes rapides. En effet, trois types de valeurs propres se distinguent :

- des valeurs propres nulles correspondant aux éléments conservés ;
- des valeurs propres avec une partie réelle largement négative qui correspondent aux espèces variant rapidement ;
- des valeurs propres avec une partie réelle faiblement négative ou faiblement positive, qui font référence aux espèces évoluant plus lentement.

La détermination du temps caractéristique de coupure τ_c est réalisée par l’utilisateur. Toutes les espèces associées à des valeurs propres inférieures à cette valeur sont considérées à l’équilibre chimique. Cette simplification permet de garder uniquement les trajectoires contenues dans le sous-espace attracteur. Plus τ_c est petit, plus le système comportera de dimensions et donc d’informations. Cependant, le temps de calcul sera plus important. Un compromis entre complexité et précision des informations doit être trouvé.

Une fois l’ensemble des trajectoires trouvées, celles-ci sont regroupées dans une table décrivant l’ensemble des grandeurs thermochimiques avec un nombre réduit de paramètres.

Cette méthode se révèle vite fortement limitée. En effet, pour les basses températures, il est difficile de distinguer les temps chimiques lents et rapides et de déterminer une valeur correcte de τ_c . D'une manière générale, ces régions sont résolues par extrapolations linéaires. Les phénomènes d'auto-allumage ou les phénomènes transitoires ne peuvent pas être correctement prédits avec cette méthode. En outre, cette méthode fait évoluer le système uniquement de manière chimique et ne prend pas en compte les phénomènes physiques non chimiques tels que la turbulence ou la diffusion différentielle des espèces. Par conséquent, son champ d'application est fortement restreint. De nombreuses recherches ont été effectuées afin d'étendre le domaine d'applicabilité de cette méthode.

3.5.2.2 In situ adaptive tabulation

Dans certaines applications, seule une partie de la table chimique est nécessaire. Dans ce cas, l'utilisation d'une table chimique complète comportant plus de deux ou trois entrées implique des coûts de calculs importants. La méthode "In Situ", proposée par Pope [151, 205], se trouve particulièrement bien adaptée. La différence réside dans la génération de la table. Celle-ci est réalisée en amont du calcul CFD dans la méthode ILDM, tandis qu'elle est générée en parallèle du calcul pour la méthode ISAT. Ainsi, seules les compositions présentes sont utilisées. Lors du calcul du terme source en chaque point, le code vérifie si la composition locale a déjà été analysée ou non. Si celle-ci est présente dans la table, les valeurs en sont extraites. Sinon, l'évolution de la nouvelle composition est calculée. Les nouvelles données en résultant sont mises en mémoire dans la table.

3.5.2.3 Flamelet generated manifold et Flame Prolongation of ILDM

Une des principales limitations de la méthode ILDM réside dans sa mauvaise réponse au niveau du champ des basses températures. Pour remédier à ce problème, Van Oijen [130] développe la méthode de tabulation "Flamelet Generated Manifold" (FGM). Une méthode similaire, nommée "Flame Prolongation of ILDM" (FPI), est proposée par Gicquel [66]. Cette dernière méthode est présente dans le code YALES2 utilisé au cours de cette thèse. Une explication détaillée de celle-ci est apportée ci-après.

A l'origine, l'idée était de compléter la base de données ILDM dans le domaine des basses températures à l'aide de calculs de flammes prémélangées laminaires se propageant librement. Les auteurs ont montré par la suite que les tables ILDM et les flammes laminaires de prémélange donnaient les mêmes caractéristiques dans le domaine des hautes températures. La tabulation de la chimie à l'aide de flammes laminaires est pertinent sur l'ensemble du domaine d'inflammabilité et de température. L'approche FPI a été retenue pour une partie des calculs présentés dans cette thèse.

Un ensemble de flammes laminaires de prémélange, possédant des richesses différentes, est calculé grâce à un code de chimie détaillé, ici Cantera [34]. La réponse chimique de ces flammes est ensuite tabulée à l'aide de la variable de progrès C et de la fraction de mélange Z .

La figure 3.2 représente la température pour trois flammes de prémélange, qui sont ensuite stockées sous forme de table. Une flamme correspond à une ligne verticale, et toute la gamme de richesse est explorée sur l'axe horizontal. Chaque flamme est indépendante et la carte donne une indication de l'évolution de la température de flamme en fonction de la richesse.

L'utilisation de cette méthode permet de transporter uniquement deux variables, Z et Y_C au lieu de transporter chaque espèce. De plus, par construction, le scalaire Z est un scalaire passif : aucun terme source n'apparaît donc dans son équation de transport.

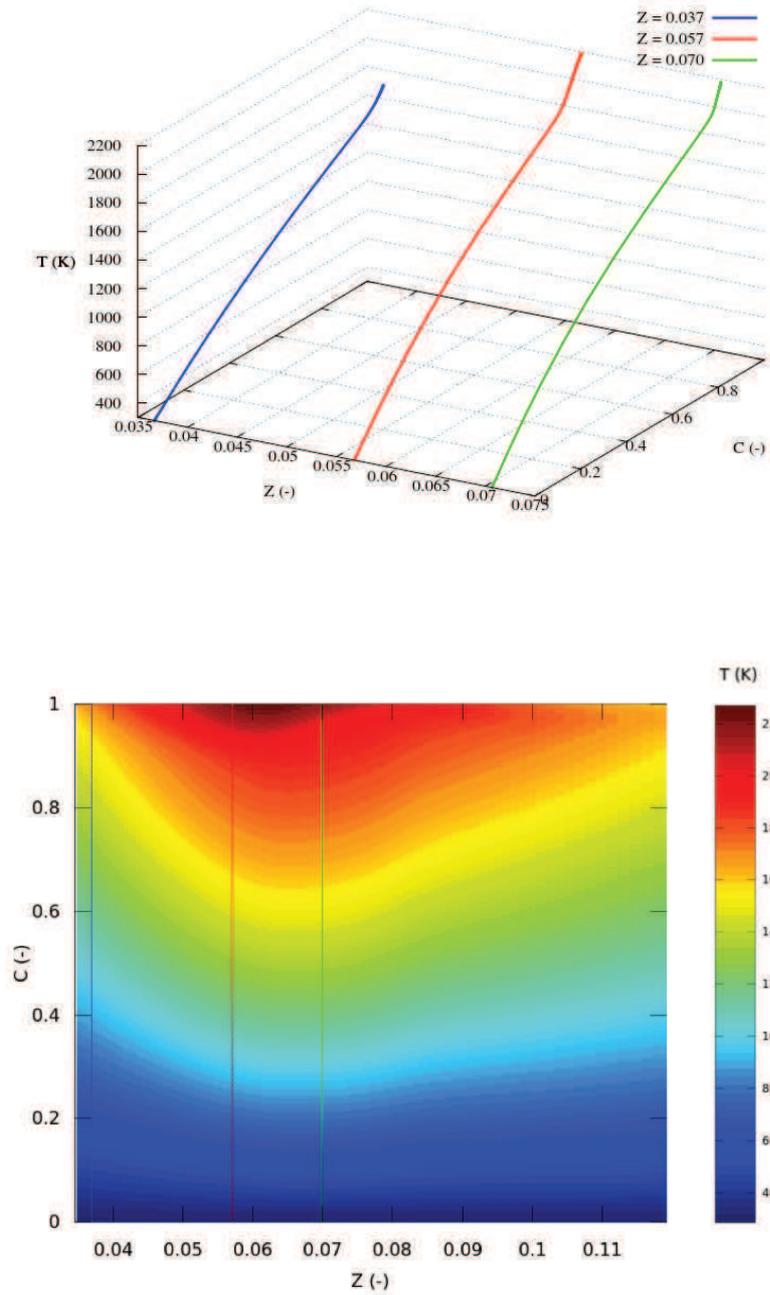


Fig 3.2 – Principe de la méthode de tabulation FPI. Calcul de flammes 1D laminaires, puis mise en données sous forme de tables. Représentation $T = f(Z, C)$ pour une table comprenant 80 flammelettes.

Les équations de transport de Z et Y_C remplacent l'équation (3.16),

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Z}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_Z \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right), \quad (3.128)$$

$$\frac{\partial \rho Y_C}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{Y_C} \frac{\partial Y_C}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_{Y_C}. \quad (3.129)$$

L'approche Low-Mach permet de découpler l'équation de transport de l'enthalpie sensible du système. Le système est considéré comme adiabatique, l'équation de transport de l'enthalpie sensible (3.15) se découple du système et n'a plus besoin d'être résolue. Le lien entre la thermodynamique et les variables du fluide est réalisé grâce à une équation d'état et à la table chimique. En général, l'équation des gaz parfaits est retenue,

$$P_0 = \rho r T. \quad (3.130)$$

La chimie tabulée présente l'avantage de ne transporter que deux variables pour représenter l'ensemble des espèces, ce qui implique un temps de calcul relativement rapide. Cependant, elle présente certains inconvénients.

Premièrement, vu que seules deux variables sont transportées, uniquement deux coefficients de diffusion sont utilisés, un pour la variable de progrès et un pour la fraction de mélange. La diffusion de chaque espèce n'est alors pas considérée et la diffusion différentielle ne peut pas être prise en compte et observée de manière correcte. Celle-ci est pourtant inévitable lors d'une combustion. En effet, plusieurs espèces chimiques ainsi que des radicaux sont présents dans la flamme. Toutes ces espèces ne possèdent pas la même vitesse de diffusion, et n'évoluent pas de la même manière à travers la flamme. Pour prendre en compte cette diffusion différentielle, des modifications doivent être apportées aux méthodes de tabulation [126].

Deuxièmement, la chimie tabulée est connue pour ne pas répondre correctement aux effets de courbure [176].

Le troisième point, qui est le plus limitant dans ce travail de thèse, est qu'une table chimique renvoie à une composition unique pour une valeur de la fraction de mélange et une valeur de la variable de progrès. Il n'est pas possible actuellement de prendre en compte des mélanges de composition ou de température différentes grâce à la chimie tabulée. Il faudrait alors rajouter des paramètres et effectuer des validations pour chaque nouvelle entrée.

3.6 Introduction à la turbulence

Les écoulements présents dans la plupart des applications industrielles telles que les turbines à gaz ou les moteurs à combustion interne sont qualifiés de fortement turbulents. La turbulence se traduit par des champs de vitesse fluctuants de manière aléatoire, ainsi que par la présence d'une grande gamme de tourbillons. Les équations introduites dans la section 3.2.1 correspondent à une résolution exacte et instantanée de l'écoulement. Nous avons vu que pour des raisons de temps de calcul, il était nécessaire, dans le cas de la chimie détaillée, d'impliciter la résolution des termes sources chimiques qui amène des échelles temporelles extrêmement petites. Dans le cas d'un écoulement turbulent, une multiplicité d'échelles spatiales apparaît.

Afin d'avoir une meilleure idée de l'étendue de ces échelles, les principaux nombres caractéristiques de la turbulence sont présentés. Dans un second temps, les différentes méthodes permettant de modéliser la turbulence sont énumérées.

3.6.1 Echelles et nombres caractéristiques de la turbulence

Le critère déterminant pour savoir si un écoulement est laminaire ou turbulent est le nombre de Reynolds. Ce dernier représente le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses,

$$Re = \frac{\rho u L}{\mu} = \frac{u L}{\nu}, \quad (3.131)$$

où u et L représentent respectivement une vitesse et une taille caractéristique, μ et ν sont les viscosités dynamique et cinématique du fluide.

En dessous d'un certain nombre de Reynolds, nommé Reynolds critique, l'écoulement est dit laminaire. Dans ce cas, les forces d'inertie sont trop faibles pour perturber la dynamique de l'écoulement. Au delà de ce Reynolds critique, les écoulements turbulents apparaissent. La transition entre les différents états ne se fait pas pour un nombre de Reynolds précis, elle dépend de plus de la géométrie du domaine dans lequel le fluide évolue, voire des conditions de rugosité des parois.

Un écoulement turbulent est composé d'une multitude de tourbillons de tailles diverses. Ces structures tourbillonnaires se définissent à l'aide de leur état énergétique. En effet, un transfert d'énergie se produit des plus grandes échelles, qui sont les plus énergétiques, vers les plus petites. Ce principe de cascade énergétique a été introduit par Richardson [158] et Kolmogorov [97] et est illustré sur la figure 3.3.

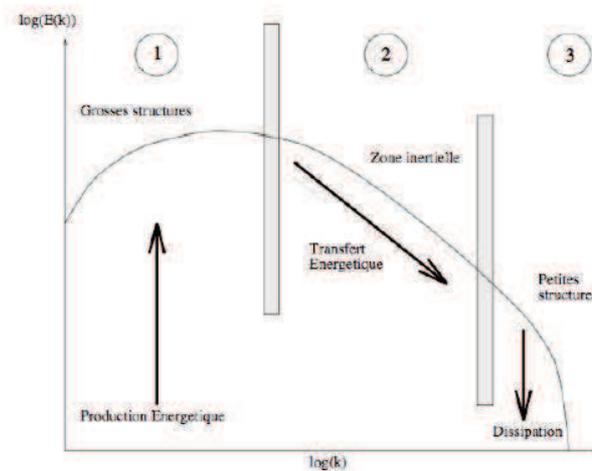


Fig 3.3 – Principe de la cascade énergétique, extrait de [155].

Trois groupes de structures se distinguent, définis par des échelles différentes. Tout d'abord, la plus grande échelle, l_t , est appelée échelle intégrale (car elle est définie à partir de l'intégrale de la fonction d'autocorrélation spatiale du signal de vitesse) et est peu affectée par la viscosité. Elle correspond à l'échelle macroscopique de l'écoulement et est liée aux grandes structures anisotropes. A l'aide de l_t , un nouveau nombre de Reynolds, noté Reynolds turbulent, comparant le transport turbulent aux forces visqueuses est défini,

$$Re_t = \frac{u'_t l_t}{\nu}, \quad (3.132)$$

avec u'_t correspondant à la vitesse caractéristique des fluctuations.

Ensuite, la zone inertielle regroupe l'ensemble des échelles intermédiaires du spectre. Ces échelles assurent le transfert d'énergie des plus grandes vers les plus petites échelles. L'échelle de Taylor, λ , se situe dans cette zone. Cette échelle peut être interprétée comme la distance parcourue par un tourbillon de l'échelle de Kolmogorov durant une rotation d'un tourbillon de grande échelle.

Pour finir, l'échelle de Kolmogorov, η_k , caractérise la taille des plus petites structures présentes dans l'écoulement,

$$\eta_k \approx \left(\frac{\nu}{\epsilon}\right)^{1/4}, \quad (3.133)$$

avec ϵ le taux de dissipation de l'énergie cinétique de la turbulence.

Cette échelle est purement dissipative et ne dépend plus de l'énergie. Tout comme la taille caractéristique des tourbillons, l'échelle de vitesse diminue aussi le long de la cascade. Un nombre de Reynolds caractéristique de l'échelle de Kolmogorov apparaît alors,

$$Re_k = \frac{u'_k \eta_k}{\nu} \approx 1. \quad (3.134)$$

Le rapport entre l'échelle intégrale et l'échelle de Kolmogorov est donné par :

$$\frac{l_t}{\eta_k} = O(Re_t^{3/4}). \quad (3.135)$$

Cette dernière équation montre l'étendue des échelles de la turbulence et illustre parfaitement la difficulté numérique à représenter correctement l'ensemble des échelles de manière précise. Par conséquent, des méthodes de résolution plus ou moins précises de la turbulence pour les équations aux dérivées partielles régissant un fluide réactif ont été développées. Celles-ci sont explicitées dans la section suivante.

3.6.2 Modélisation de la turbulence

3.6.2.1 DNS-LES-RANS

Plusieurs approches numériques permettant une résolution des équations de Navier-Stokes plus ou moins précise ont été développées au cours de ces dernières années. Celles-ci sont représentées de manière schématique sur la figure 3.4.

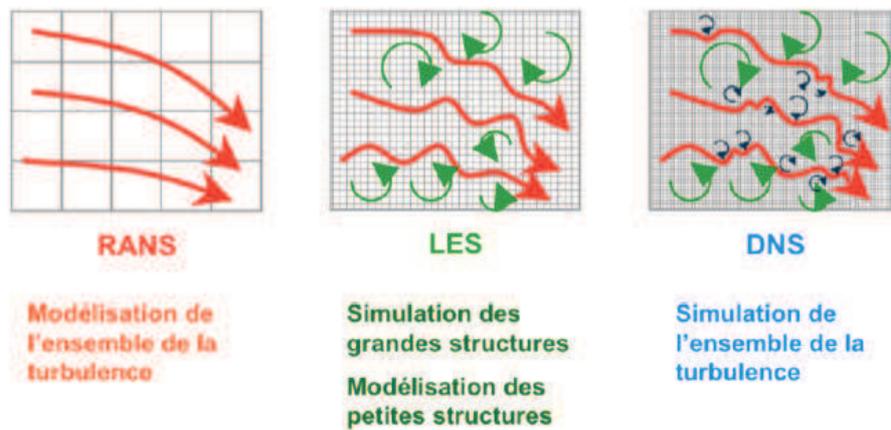


Fig 3.4 – Représentation des trois niveaux de résolution des équations de Navier-Stokes, extrait de Roux [163].

La première approche correspond à la plus précise, et est nommée Simulation Numérique Directe (DNS). Cette approche est représentée sur l'image de droite. Dans ce type de simulation, l'ensemble des échelles spatiales et temporelles présentes dans la turbulence est résolu. Il s'agit d'une approche relativement coûteuse, limitée actuellement à des codes de recherche et à des géométries simples de petite taille ou à des simulations en deux dimensions [76, 206].

La deuxième technique nommée LES pour Simulations aux Grandes Echelles, située sur l'image centrale, modélise les petites échelles de la turbulence et résout directement les plus grandes échelles. L'écriture des modèles suppose que l'échelle de coupure entre les échelles

résolues et les échelles modélisées se situe dans la gamme des échelles inertielles. Les équations de Navier-Stokes sont filtrées et des modèles de sous-mailles sont introduits. La résolution des grandes échelles permet une bonne description du mélange, paramètre clé de la combustion. Cette approche a d'abord été développée dans le cadre d'écoulements non réactifs [107, 145, 166] puis a très vite été reprise dans le domaine de la modélisation de la combustion [149, 148, 194]. Cette approche est celle adoptée dans le code de calcul YALES2.

La dernière approche est en réalité la plus ancienne. En effet, les deux approches précédentes sont rendues possibles grâce à la puissance des calculateurs actuels. Historiquement, seul un suivi des valeurs moyennées des écoulements était réalisable. Il s'agit de la méthode RANS pour Reynold Averaged Navier-Stokes. Cette approche est représentée sur le cadran gauche de la figure 3.4. De nombreuses études académiques et industrielles ont pu être réalisées grâce à celle-ci [99, 123]. Les résultats obtenus sont satisfaisants en terme de position de flamme ou de répartition d'air. Des limitations apparaissent lors de l'introduction de phénomènes instationnaires tels que l'allumage d'un mélange air/carburant.

Dans ces deux dernières techniques, les équations de Navier-Stokes sont filtrées. Des termes non fermés apparaissent et des modèles sont nécessaires à leur fermeture.

Il est clair que la précision de la résolution et le temps de calcul pour résoudre les équations sont étroitement liés. Une turbulence moins résolue présente l'avantage non négligeable d'un calcul plus rapide ainsi que la possibilité de simuler des domaines plus grands. Cependant, un certain nombre d'informations est perdu. Le type de résolution choisi pour une simulation dépend fortement du caractère des résultats souhaités.

3.6.2.2 Modèles de turbulence

Lors du filtrage des équations pour l'approche LES, des termes dits de sous-maille apparaissent. Ces termes sont non-fermés et nécessitent l'utilisation de modèles appropriés. Avant de présenter ces termes, il est nécessaire d'introduire certaines notions. Tout d'abord, la moyenne de Reynolds, \bar{f} , d'une grandeur physique f ,

$$f = \bar{f} + f', \quad (3.136)$$

où \bar{f} et f' correspondent respectivement à la valeur moyennée et aux fluctuations de f .

La seconde notion est la moyenne de Favre,

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}}. \quad (3.137)$$

Le tenseur des contraintes de sous-maille s'écrit alors,

$$t_{ij} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j). \quad (3.138)$$

Un des premiers modèles pour modéliser ce terme a été proposé par Smagorinsky [173] en 1963 et repose sur l'hypothèse de Boussinesq [25],

$$t_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}t_{kk} = -\mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) = -2\mu_t \tilde{S}_{ij}, \quad (3.139)$$

avec μ_t une viscosité dynamique turbulente et $\nu_t = \mu_t/\rho$ la viscosité cinématique turbulente. La notion de viscosité turbulente sera présente dans de nombreux modèles de sous-maille.

Le modèle de Smagorinsky est basé sur l'hypothèse d'équilibre entre production et dissipation d'énergie cinétique au niveau de l'échelle de filtrage. La turbulence est ici considérée

uniquement comme un phénomène dissipatif. Dans son modèle, l'expression de ν_t fait apparaître une constante, dépendante des configurations étudiées.

Afin d'améliorer ce modèle, Germano [63] propose une détermination dynamique de la constante. Il tire en effet partie de la connaissance des échelles résolues pour évaluer les flux de sous-maille.

Ce modèle semble vraiment efficace dans une large gamme d'applications. Il peut cependant introduire des difficultés numériques lorsque la constante devient négative. Le modèle de Smagorinsky dynamique a été adopté pour les travaux présentés dans ce manuscrit.

D'autres modèles pour la viscosité turbulente ont été proposés par Nicoud *et al.* [129] et Vreman [195]. La turbulence n'étant pas au cœur de cette thèse, le lecteur est amené à se référer aux références bibliographiques pour obtenir une description complète de ces modèles.

3.6.2.3 Modélisation de la combustion turbulente

Afin de pouvoir présenter le modèle de combustion turbulente utilisé au cours de ces travaux de thèse, un bref récapitulatif des différentes techniques servant à modéliser la combustion turbulente est ici rapporté. Ces techniques se classent en trois catégories [193] :

- l'approche géométrique : le front de flamme est ici considéré comme une surface géométrique très fine et mobile dans l'espace physique. Cette approche est généralement retenue lors de l'étude des flammes turbulentes prémélangées. Plusieurs méthodes se distinguent au sein de cette catégorie : la méthode de la G-equation [147, 203], les approches de flammes épaissies [30, 105] et les modèles à densité de surface de flamme [22, 116] ;
- l'approche basée sur l'analyse du mélange turbulent : dans cette approche, le taux de réaction est contrôlé par le mélange turbulent, décrit en terme de taux de dissipation scalaire [27]. Les petites échelles du taux de dissipation des espèces contrôlent le mélange des réactifs. Par conséquent, elles jouent un rôle dominant pour la modélisation de la combustion. Cette approche est possible lorsque le temps caractéristique de la turbulence est très élevé par rapport au temps caractéristique chimique ;
- l'approche statistique en un point : les champs scalaires sont collectés et analysés en chaque point puis décrits à l'aide de fonction densité de probabilité (PDF).

Le modèle utilisé au cours de cette thèse fait partie de l'approche statistique. Une description détaillée est donnée dans la section suivante.

3.6.3 Prise en compte de la turbulence dans la modélisation de la chimie

3.6.3.1 Modèle PCM-FPI

Que ce soit avec l'approche RANS ou l'approche LES, il est nécessaire de modéliser l'ensemble ou certaines des échelles de la turbulence. Le modèle Presumed Conditional Moments (PCM) est proposé dans ce but. Ce modèle permet de lier la chimie et la turbulence et est associé à la méthode FPI présentée précédemment. Il a été appliqué avec succès dans des calculs RANS [57, 192] avant d'être utilisé en LES [49, 61].

Cette méthode appartient à l'approche statistique, par conséquent, les termes sources doivent être modélisés à l'aide de fonction densité de probabilité (PDF). La forme de ces PDF dépend de la fonction choisie pour leur modélisation ainsi que de la résolution du calcul. Dans l'approche RANS, la PDF présente deux pics de probabilités aux valeurs 0 et 1. La PDF de Z traduit alors des alternances entre carburant et oxygène. De l'autre côté, la PDF de C correspond aux variations entre gaz frais et gaz brûlés. Dans l'approche LES, les fluctuations de sous-maille sont mises sous la forme d'une cloche gaussienne qui rend compte de la répartition de la variable dans

la sous-maille. La fonction β [26, 70] est la fonction mathématique la plus couramment utilisée pour modéliser les PDF de scalaire.

Les termes sources filtrés s'écrivent de la manière suivante :

$$\tilde{\omega}_k = \int_{C^*=0}^{C^*=1} \int_{Z^*=0}^{Z^*=1} \omega_k \tilde{P}(Z^*, C^*) dZ^* dC^*, \quad (3.140)$$

où $\tilde{P}(Z^*, C^*)$ correspond à la fonction densité de probabilité jointe de Z et C .

L'avantage d'exprimer le terme source en fonction de C et non de Y_c réside dans le fait que la probabilité conditionnée $\bar{P}(C^*|Z^*)$ est peu dépendante de la fraction de mélange [191], ce qui permet de poser l'hypothèse suivante :

$$\bar{P}(C^*|Z^*) \approx \bar{P}(C^*). \quad (3.141)$$

En décomposant de façon exacte $\tilde{P}(Z^*, C^*)$, on obtient :

$$\tilde{P}(Z^*, C^*) = \bar{P}(C^*|Z^*) \times P(Z^*), \quad (3.142)$$

ce qui permet d'obtenir,

$$\tilde{P}(Z^*, C^*) = \bar{P}(C^*) \times P(Z^*). \quad (3.143)$$

Les termes sources filtrés s'expriment à l'aide de deux PDF indépendantes,

$$\tilde{\omega}_k = \int_{C^*=0}^{C^*=1} \int_{Z^*=0}^{Z^*=1} \omega_k(Z^*, C^*) \bar{P}(C^*) P(Z^*) dZ^* dC^*. \quad (3.144)$$

La forme des PDF doit maintenant être précisée. L'objectif étant ici de faire de la LES très résolue, on supposera que les mailles sont suffisamment fines pour négliger les variations de la fraction de mélange au sein d'une maille. Par conséquent, la PDF de Z est présumée à l'aide d'une fonction de Dirac. Les variations de la variable de progrès s'effectuent à plus petite échelle et une fonction β est alors choisie. Celle-ci est paramétrée à l'aide des deux premiers moments de la variable,

$$\bar{P}(C) = \frac{C^{a-1}(1-C)^{b-1}}{\int_0^1 (C^* - 1)^{a-1} (1 - C^*)^{b-1} dC^*}, \quad (3.145)$$

avec pour les coefficients a et b ,

$$a = \tilde{C} \left(\frac{1}{S_C} - 1 \right) \quad \text{et} \quad b = a \left(\frac{1}{\tilde{C}} - 1 \right). \quad (3.146)$$

Un nouveau terme, S_C , appelé facteur de ségrégation apparaît dans la formulation de a . Il s'agit de la variance normalisée,

$$S_C = \frac{\tilde{C}^2 - \tilde{C}\bar{C}}{\tilde{C}(1 - \tilde{C})}. \quad (3.147)$$

Celle-ci peut être formulée à l'aide de plusieurs modèles. Tout d'abord, le modèle du gradient [124],

$$S_C = \frac{C_S \Delta |\nabla \tilde{C}|}{\tilde{C}(1 - \tilde{C})}, \quad (3.148)$$

où C_S représente la constante du modèle et Δ la taille du filtre. Ce modèle est bien adapté pour des simulations mal résolues. Lorsque la simulation devient très résolue, il est préférable d'utiliser la variance basée sur la loi de mélange [124, 138],

$$S_C = \frac{C_S \Delta^2 |\nabla \tilde{C}|^2}{\tilde{C}(1 - \tilde{C})}. \quad (3.149)$$

Une nouvelle entrée, S_C , est ajoutée à la table laminaire pour prendre en compte les fluctuations de sous-maille.

3.6.3.2 F-TACLES

Plus récemment, une nouvelle approche de chimie tabulée a été développée par Fiorina et al [58]. En effet, la chimie tabulée par la méthode PCM-FPI ne semble pas être adaptée lorsqu'une dégénérescence laminaire se produit, c'est-à-dire que les plissements de sous-maille disparaissent. Ce régime est observé lorsque les vitesses de fluctuation de sous-maille deviennent plus petites que la vitesse laminaire. Dans cette situation, les β -PDF ne garantissent pas une description correcte du front de flamme filtré. Afin d'assurer une bonne prédiction de la vitesse de flamme laminaire du front de flamme filtré, la méthode Filtered Tabulated Chemistry for LES (F-TACLES) est proposée.

Dans cette méthode les flammes mono-dimensionnelles sont filtrées avant d'être stockées dans la table. La taille du filtre et la variable de progrès sont alors les entrées principales. Afin de prendre en compte les structures turbulentes, certains termes sont multipliés par un facteur de plissement correspondant au rapport de la vitesse turbulente sur la vitesse laminaire de flamme.

3.7 Extension à la combustion stratifiée

Un état de l'art sur la combustion stratifiée a été réalisé dans le chapitre précédent. De nombreuses études ont été effectuées en prenant en compte différentes modélisations de la chimie. Un bref récapitulatif de ces études est donné ci-après.

La prise en considération de l'hypothèse de flammelettes lors d'étude de flammes stratifiées constitue le point essentiel de la stratégie. L'approche de flammelette a été introduite par Peters [140]. En effet, contrairement aux flammes laminaires, les flammes turbulentes possèdent de nombreuses structures. L'élaboration de diagrammes fonction des caractéristiques principales de la flamme, à savoir l'échelle intégrale, l'énergie cinétique turbulente ou encore le taux de dissipation permet de classer les différentes structures existantes. Le diagramme proposé par Peters

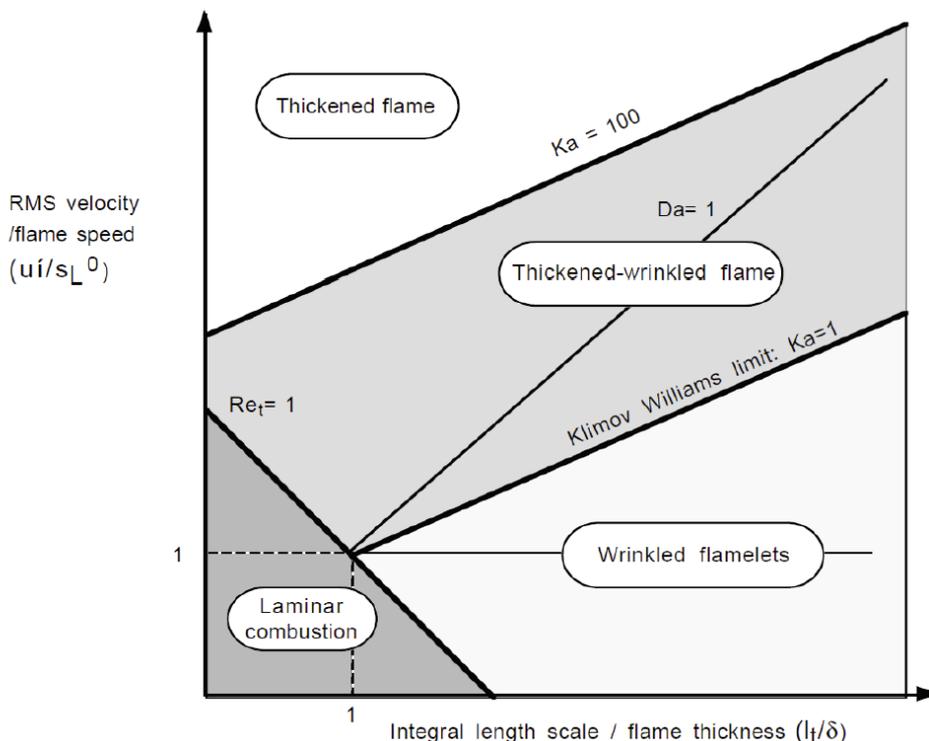


Fig 3.5 – Diagramme de combustion prémélangée turbulente proposé par Peters [141].

[141] est représenté sur la figure 3.5.

L'hypothèse de flammelettes correspond au régime des flammes plissées et revient à supposer que la zone de réaction est suffisamment fine pour correspondre localement à des flammes laminaires : la structure de flamme est plus fine que l'ensemble des échelles de turbulence. Cette approche permet une modélisation de la chimie détaillée à l'aide d'une table chimique.

Concernant la combustion stratifiée, des études réalisées en simulation numérique directe [77, 150, 79] ont montré la validité de cette hypothèse pour des flammes stratifiées. De ce fait, les modèles utilisés pour décrire les flammes de prémélange à l'aide de cette hypothèse ont été étendus pour être applicables aux flammes stratifiées.

En effet, des études menées récemment [51, 101] concernaient ce type de flammes : ces études étendent aux flammes stratifiées des modèles existants pour les flammes de prémélange [59, 100].

Le modèle FGM a lui aussi été étendu aux flammes de diffusion et surtout aux flammes partiellement prémélangées [127]. Auzillon et al [9] proposent une extension de la méthode F-TACLES. La stratification est ici vue à très petite échelle, elle fait partie de la modélisation de sous-maille.

Le modèle G-equation a aussi été utilisé pour réaliser des simulations LES de flammes stratifiées [162]. Dans cette étude, le suivi de la flamme par level-set (ou méthode des lignes ou surfaces de niveau) est couplé à une variable de progrès transportée afin de prendre en compte les effets dus à la stratification [95].

La diversité des modèles utilisés pour la combustion stratifiée ne manque pas. En effet, le modèle de densité de surface de flamme a aussi été testé [154].

Les méthodes numériques utilisées pour les simulations effectuées dans ce manuscrit viennent d'être présentées. Mener à bien une simulation n'est pas une tâche aisée. Cependant, le post-traitement des résultats obtenus est tout aussi important pour une compréhension pertinente des phénomènes physiques. Dans cette thèse, beaucoup d'analyses porteront sur la vitesse de flamme. Cette notion est précisée dans la section suivante.

3.8 Vitesses de flamme

La vitesse de flamme varie en fonction du milieu au sein duquel la flamme évolue, qu'il soit laminaire ou turbulent, ou encore homogène ou hétérogène. Elle constitue une caractéristique essentielle de la flamme. Le terme "vitesse de flamme" n'étant pas dénué d'ambiguïté, une partie de cette thèse sera consacrée à préciser cette notion.

Pour une flamme mono-dimensionnelle en propagation libre, la vitesse de flamme, s_L , peut classiquement se définir comme la vitesse à laquelle la flamme, ici considérée comme une interface, se déplace relativement aux gaz frais.

Cependant, selon le référentiel choisi, la description de la propagation d'un front de flamme dans un milieu nécessite la prise en compte de plusieurs vitesses. La figure 3.6 schématise les différentes vitesses qui seront précisées dans cette section.

La flamme est considérée comme une interface gaz frais/gaz brûlés, définie par exemple pour une certaine iso-température θ_F . En tout point de la flamme, il est possible de définir le vecteur normal local, dirigé dans l'exemple des gaz brûlés vers les gaz frais, et donné par la direction du gradient local de température :

$$\mathbf{n} = -\frac{\nabla\theta}{|\nabla\theta|}, \quad (3.150)$$

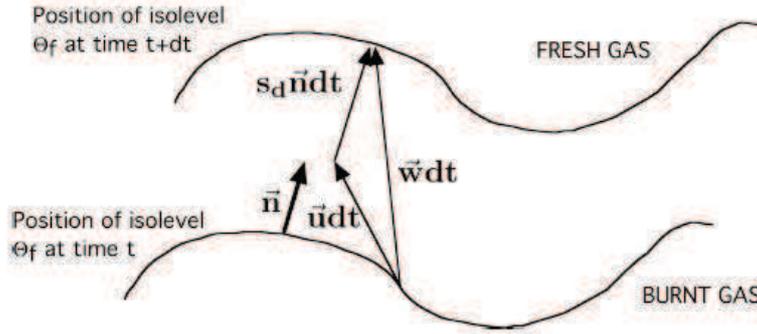


Fig 3.6 – Schéma des vitesses de flamme, extrait de [149].

avec θ la température réduite.

Sur la figure 3.6, trois vitesses locales peuvent être définies.

Premièrement, la vitesse locale du fluide \mathbf{u} dans le référentiel du laboratoire fixe. Cette vitesse est dépendante du milieu dans lequel la flamme évolue.

Deuxièmement la vitesse de déplacement. Elle équivaut à la vitesse du front de flamme relativement au fluide, c'est-à-dire à la différence entre la vitesse du fluide \mathbf{u} et la vitesse du front de flamme \mathbf{w} ,

$$s_d = (\mathbf{w} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = s_a - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}. \quad (3.151)$$

La troisième vitesse dite vitesse absolue apparaît dans cette dernière équation. Elle est la plus simple à mesurer et correspond à la vitesse du front de flamme relativement à un référentiel fixe. Cette vitesse est normale au front de flamme et sa valeur est fonction de l'iso-température choisie,

$$s_a = \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}. \quad (3.152)$$

Les vitesses présentées ci-dessus sont locales. Cependant, une notion globale pour la vitesse de flamme peut également être introduite.

La vitesse de consommation, qui représente la vitesse à laquelle les réactifs sont brûlés, est calculée grâce à l'intégrale du terme source au travers de la flamme, soit :

$$s_c = -\frac{1}{\rho_1 Y_{F,1}} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_F \, \mathbf{dn}, \quad (3.153)$$

où l'indice 1 fait référence aux gaz frais. Le terme ρ_1 correspond donc à la densité des gaz frais et $Y_{F,1}$ à la fraction massique de fuel dans ceux-ci.

Si sa définition de la vitesse laminaire est simple à comprendre, la mesurer n'est pas évident. De nombreuses configurations sont utilisées pour mesurer la vitesse de flamme laminaire, en particulier les flammes à contre-courant [52], les flammes sphériques en expansion [175] et les flammes planes adiabatiques stabilisées [24]. Dans la section suivante, la flamme plane laminaire est tout d'abord présentée. La flamme sphérique en expansion est ensuite étudiée afin de mieux illustrer les notions des différentes vitesses.

3.8.1 Vitesses d'une flamme plane laminaire non étirée

La vitesse d'une flamme plane laminaire mono-dimensionnelle se propageant librement est la vitesse de référence de toutes les études portant sur la combustion. Elle est notée s_L^0 . Ce

cas représente le cas le plus simple. Dès lors qu'une vitesse d'entrée du fluide est ajoutée, les différentes notions de vitesse prennent sens. Un tel cas est schématisé sur la figure 3.7.

La flamme évolue ici dans un milieu ayant une vitesse d'entrée u_1 . Cette vitesse étant différente de la vitesse laminaire, la flamme se déplace dans le référentiel du laboratoire. Si \mathbf{n} est le vecteur normal dirigé des gaz brûlés vers les gaz frais, alors $\mathbf{n} = -\mathbf{x}$. La vitesse d'entrée du fluide s'écrit : $\mathbf{u}_1 = -u_1\mathbf{n}$. Dans cet exemple, la vitesse du fluide est prise inférieure à s_L^0 . Par conséquent, le front de flamme se décale progressivement vers la gauche où se situent les gaz frais. La vitesse d'entrée implique que son mouvement est ralenti par rapport à une flamme en propagation libre.

La flamme n'étant pas épaissie ou amincie au cours du temps¹, toutes les iso-températures évoluent à la même vitesse absolue. En reprenant les notations de la section 3.8, les valeurs des différentes vitesses sont obtenues :

$$\mathbf{w} = (s_L^0 - u_1)\mathbf{n}, \quad (3.154)$$

et donc

$$s_a = s_L^0 - u_1, \quad (3.155)$$

qui est positif.

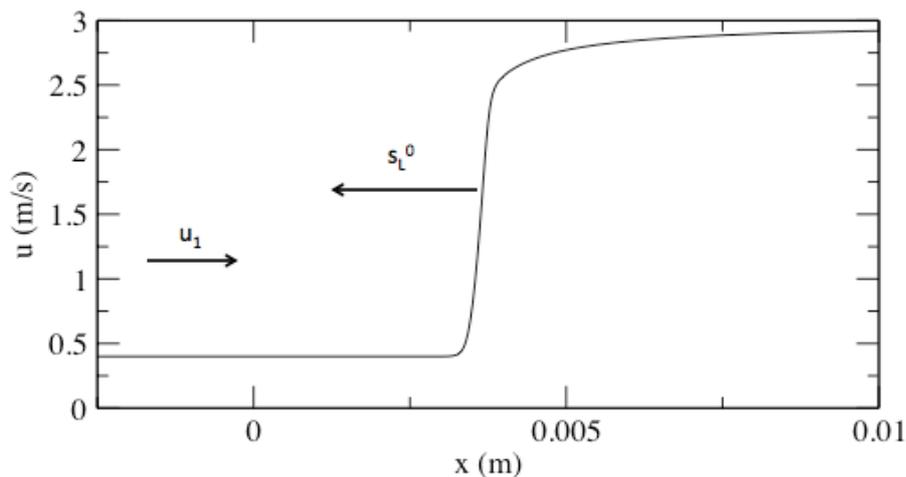


Fig 3.7 – Schéma d'une flamme plane laminaire ayant une vitesse d'entrée \mathbf{u}_1 .

La vitesse du fluide en entrée est connue mais il est important de pouvoir déterminer la vitesse du fluide en tout point du domaine.

L'équation de continuité dit que le flux massique est conservé dans l'espace et est égal au flux d'entrée. Dans le référentiel de la flamme,

$$\rho(\mathbf{u} - \mathbf{w})\mathbf{n} = \rho_1(\mathbf{u}_1 - \mathbf{w})\mathbf{n}. \quad (3.156)$$

La vitesse du fluide en chaque point s'en déduit selon,

$$u = -\mathbf{u}\mathbf{n} = -s_a + (u_1 + s_a)\frac{\rho_1}{\rho} = u_1 + s_L^0 \left(\frac{\rho_1}{\rho} - 1 \right). \quad (3.157)$$

Le fluide passe de la vitesse u_1 à $u_1 + s_L^0 (\rho_1/\rho - 1)$ en accélérant à travers le front de flamme.

1. Il s'agit d'une solution en onde progressive des équations de bilan 1D.

La vitesse de déplacement mesure la différence entre la vitesse absolue de la flamme et celle du fluide,

$$s_d = s_a - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n} = s_L^0 \frac{\rho_1}{\rho}. \quad (3.158)$$

3.8.2 Vitesses d'une flamme sphérique en expansion

Une seconde étude académique permettant d'observer et de comprendre les vitesses de flamme est la flamme sphérique en expansion. Le schéma de cette flamme est représenté sur la figure 3.8.

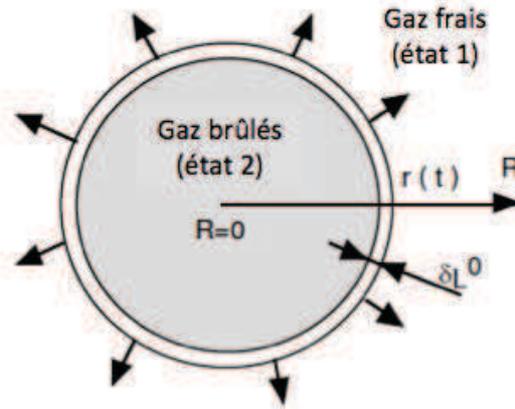


Fig 3.8 – Schéma d'une flamme sphérique en expansion à pression constante. $r(t)$ est le rayon au niveau du front de flamme. Extrait de [149].

Cette configuration présente en effet l'avantage, à pression constante, d'avoir un taux d'étiement variant de manière continue. Par conséquent, il est possible de remonter à la vitesse de flamme laminaire. En effet, l'étiement d'une flamme est donné par [32, 121] :

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt}, \quad (3.159)$$

où A est la surface de flamme.

Cette expression, pour une flamme sphérique à pression constante devient,

$$\kappa = \frac{2}{r} \frac{dr}{dt}. \quad (3.160)$$

Dans ce dispositif, le fluide et le front de flamme sont en mouvement. Afin de pouvoir étudier aisément les vitesses de flamme, une hypothèse supplémentaire est introduite : l'épaisseur de la flamme est supposée nulle. Cette hypothèse forte permet de déterminer sans difficulté la vitesse du fluide et celle de la flamme et ainsi de retrouver de manière analytique les différentes vitesses de flamme.

Si Y_p désigne la fraction massique des gaz brûlés, son équation de conservation est donnée, en reprenant les notations de l'équation (3.6), par :

$$\frac{\partial \rho Y_p}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho (u_i + V_{p,i}) Y_p) = \dot{\omega}_p. \quad (3.161)$$

Les gaz brûlés sont considérés comme inertes à l'intérieur de la sphère et absents en dehors : les flux diffusifs et convectifs des gaz brûlés sont nuls pour $R = 0$ et $R = \infty$. En écrivant

l'équation précédente (3.161) en coordonnées sphériques, puis en l'intégrant entre le centre de la flamme, $R = 0$, et l'extrémité du domaine, $R = \infty$, l'équation suivante est obtenue :

$$\frac{d}{dt} \left(\int_0^\infty \rho Y_p dV \right) = \int_0^\infty \dot{\omega}_p dV. \quad (3.162)$$

L'équation de conservation de l'espèce k , écrite dans le référentiel de la flamme, pour une flamme évoluant dans une direction unique x s'écrit :

$$\rho_1 (Y_{k,1} - Y_{k,2}) s_c = - \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_k dx, \quad (3.163)$$

où l'indice 1 correspond aux gaz frais et l'indice 2 aux gaz brûlés. Les flux diffusifs sont supposés nuls aux extrémités du domaine.

Pour la fraction massique des produits, cette équation devient :

$$\rho_1 Y_{p,2} s_c = \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_p dx. \quad (3.164)$$

Dans le cas d'une flamme sphérique en expansion, la flamme évolue le long du rayon. En passant l'équation (3.162) en coordonnées sphériques, il vient

$$\int_0^\infty \dot{\omega}_p dV = 4\pi r(t)^2 \int_0^\infty \dot{\omega}_p dr = 4\pi r(t)^2 \rho_1 s_c Y_{p,2}. \quad (3.165)$$

Le terme de gauche de l'équation (3.162) correspond à l'intégrale de la masse sur le volume. Puisque la flamme est considérée comme une interface, la masse de gaz brûlés se réduit à

$$\int_0^\infty \rho Y_p dV = \rho_2 Y_p^2 \frac{4\pi}{3} r(t)^3. \quad (3.166)$$

En regroupant les équations (3.165) et (3.166) la vitesse de consommation s'exprime selon

$$s_c = \frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{d}{dt} r(t). \quad (3.167)$$

La première vitesse locale apparaît dans cette équation. En effet, la vitesse absolue correspond à la vitesse à laquelle la flamme se déplace par rapport au laboratoire, et vaut

$$s_a = \frac{dr}{dt}. \quad (3.168)$$

L'objectif consiste maintenant à calculer la vitesse de déplacement, s_d . Sous l'hypothèse de flamme d'épaisseur nulle, il est aisé de déterminer la vitesse du fluide dans le domaine. En effet, une flamme sphérique en expansion dans un milieu homogène est ici étudiée. La vitesse du fluide est nulle pour tout rayon inférieur à celui du front de flamme : $R < r(t)$, $u(r) = 0$. Pour $R > r(t)$, la vitesse du fluide est évaluée grâce à l'intégration de l'équation de continuité entre le centre du noyau de gaz brûlés, $r = 0$, et un rayon quelconque R . L'équation de conservation de la masse exprime que la variation de masse totale au sein d'une sphère de rayon R est égale au flux massique de gaz frais poussés en dehors de la sphère,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi \rho_2 r(t)^3 + \frac{4}{3} \pi \rho_1 (R^3 - r(t)^3) \right) = -4\pi R^2 \rho_1 u(R). \quad (3.169)$$

Pour tout rayon $R > r(t)$, la vitesse u du fluide est donnée par :

$$u(R) = \left(\frac{r(t)}{R} \right)^2 \left(1 - \frac{\rho_2}{\rho_1} \right) \frac{d}{dt} r(t). \quad (3.170)$$

Cette expression pour la vitesse permettra d'initialiser les simulations numériques de flamme sphérique en expansion.

Au niveau du front de flamme, la vitesse du fluide est discontinue. Il s'agit aussi du lieu où la vitesse du fluide est maximale. Si cette localisation est choisie pour décrire la vitesse de déplacement de la flamme, l'expression suivante est obtenue :

$$s_d = s_a - u = \frac{\rho_2}{\rho_1} \frac{d}{dt} r(t). \quad (3.171)$$

Dans ce cas particulier, la vitesse de déplacement est égale à la vitesse de consommation.

3.8.3 Vitesse turbulente

La turbulence modifie la nature de l'écoulement. La vitesse de flamme est fortement impactée par celle-ci. Afin de mieux appréhender la notion de vitesse turbulente, un front de flamme turbulent est schématisé sur la figure 3.9. Dans ce cas idéalisé, la vitesse du fluide u est constante et peut être divisée en une partie moyenne \bar{u} et une partie fluctuante u' .

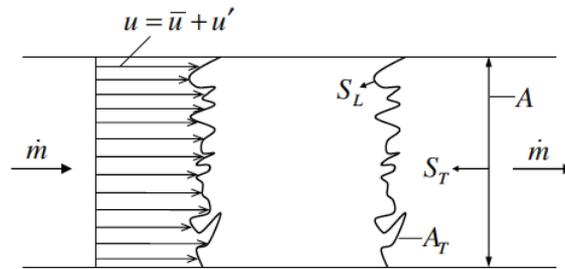


Fig 3.9 – Schéma d'une flamme de prémélange turbulente se propageant dans un conduit avec une vitesse de fluide constante, extrait de [142].

Le front de flamme est représenté par la surface A_T . Peters, dans son livre sur la combustion turbulente [142], propose une relation liant le débit massique \dot{m} traversant ce front au flux massique traversant la surface fixe A d'un front idéal non déformé,

$$\dot{m} = \rho_u s_L A_T = \bar{\rho}_u s_T A, \quad (3.172)$$

avec s_L la vitesse de flamme laminaire, s_T la vitesse de flamme turbulente et ρ_u la densité des gaz frais.

Pour un mélange homogène où la densité est constante, il est possible de simplifier l'équation précédente,

$$\frac{s_T}{s_L} = \frac{A_T}{A}. \quad (3.173)$$

Cette expression permet de lier l'augmentation de la surface du front de flamme (due à la turbulence) à l'augmentation de la vitesse de ce front.

3.9 Conclusion

Dans ce chapitre, les outils de modélisation ont été présentés. La chimie détaillée semble nécessaire à la simulation de gaz dilués par des gaz brûlés. En effet, dans de tels cas, des gaz de composition et de température variables sont présents dans le même domaine. Une description suffisamment précise de ces phénomènes est incontournable. Le problème des méthodes de

modélisation de la chimie est soit une description insuffisante de la cinétique chimique (schémas globaux), soit une simplification ne permettant pas toutes les configurations, (par exemple une chimie tabulée par la méthode FPI avec deux variables transportées). En ce qui concerne la combustion partiellement prémélangée, plusieurs techniques ont déjà été utilisées pour sa modélisation. La méthode utilisée dans cette thèse est la méthode PCM-FPI, nous veillerons à vérifier que celle-ci est bien adaptée à la simulation de telles flammes.

Dans une seconde partie, les notions importantes pour les post-traitements des calculs qui seront effectués dans cette thèse ont été abordées.

Les études précédemment réalisées sur la combustion stratifiée ont été évoquées. Les techniques de modélisation viennent d'être exposées. Ces dernières vont maintenant être appliquées à l'étude de noyau en expansion dans des milieux stratifiés.

Chapitre 4

Etude de l'expansion d'un noyau de flamme laminaire

Sommaire

4.1	Introduction	85
4.2	Mise en place d'un schéma cinétique réduit	86
4.2.1	Présentation des méthodes DRG et DRGEP	87
4.2.2	Application de la méthode DRGEP	89
4.2.3	Validation du schéma réduit	90
4.2.4	Méthodologie pour son utilisation avec YALES2	92
4.2.5	Variable de progrès et génération de la table chimique	95
4.3	Présentation des simulations	96
4.3.1	Cas étudiés	97
4.3.2	Etablissement du noyau de flamme	98
4.4	Propagation mono-dimensionnelle	99
4.4.1	Présentation de la configuration	99
4.4.2	Evolution des fractions massiques	100
4.4.3	Evolution de la vitesse de flamme	104
4.5	Propagation bi dimensionnelle	106
4.5.1	Présentation de la configuration	106
4.5.2	Particularité du cas <i>C1</i>	108
4.5.3	Evolution de la forme du noyau de flamme	109
4.5.4	Diffusion des espèces	112
4.5.5	Vitesse de flamme	116
4.5.6	Effet de l'étirement	120
4.5.7	Dynamique dans les gaz brûlés	123
4.6	Modifications de la configuration	129
4.6.1	Prise en compte d'une vitesse axiale	129
4.6.2	Influence de l'épaisseur du gradient	132
4.7	Conclusion	135

4.1 Introduction

L'objectif principal de cette thèse réside dans la compréhension de la propagation d'un front de flamme dans un milieu dilué par des gaz brûlés. La combustion stratifiée en richesse est d'abord étudiée, afin d'appliquer les résultats trouvés à la combustion diluée.

Dans ce chapitre, l'évolution d'un noyau de flamme laminaire est étudiée, aussi bien dans un milieu homogène que dans un milieu hétérogène en richesse. Les deux modèles de chimie présentés dans le chapitre 3, à savoir la chimie tabulée par la méthode FPI et la chimie complexe avec transport des espèces et de l'enthalpie sensible sont utilisés et comparés. Du au nombre d'espèces transportées dans le modèle de chimie détaillée, son utilisation reste relativement coûteuse malgré toutes les améliorations apportées au code.

A l'heure actuelle, ce critère rend les simulations en trois dimensions extrêmement onéreuse à réaliser pour des domaines dépassant quelques millimètres cube. Par conséquent, l'étude se limite ici à des cas mono et bi-dimensionnels. Ce chapitre a aussi pour rôle de tester la capacité de la chimie tabulée à prédire correctement la combustion stratifiée.

L'utilisation de la chimie complexe requiert un schéma cinétique semi-détaillé. L'hydrocarbure le plus simple possédant un comportement chimique, des vitesses de flamme laminaire ainsi que des épaisseurs proches de celles des carburants lourds est le propane [185]. De plus, il s'agit de l'hydrocarbure utilisé par S. Balusamy [11], dont les expériences sont très proches des simulations présentées dans ce chapitre.

Le début de ce chapitre est consacré à la mise en place d'un schéma cinétique semi-détaillé pour la combustion propane/air. Les conditions des simulations sont ensuite détaillées. Puis, une procédure numérique permettant l'établissement d'un noyau de flamme physique est proposée. Grâce à celle-ci, les flammes $1D$ sont réalisées et analysées. Le chapitre se poursuit par l'étude des cas $2D$ ainsi qu'une comparaison $1D-2D$. Pour finir, l'influence de l'épaisseur de la stratification ainsi que la présence d'une vitesse axiale sont examinées.

4.2 Mise en place d'un schéma cinétique réduit

Récemment, la taille des schémas cinétiques permettant de décrire de façon la plus complète possible la combustion de combustible a augmenté de manière considérable. De ce fait, les mécanismes disponibles contiennent plus d'une centaine d'espèces et plus d'un millier de réactions pour la combustion de certains carburants [81, 201].

De tels schémas sont particulièrement bien adaptés pour les méthodes de chimie tabulée présentées dans la section 3.5. A contrario, ils ne sont pas utilisables en chimie complexe, méthode dans laquelle chaque espèce nécessite une équation de transport. Les termes sources chimiques sont dépendants du nombre de réactions du mécanisme. Lorsque le nombre de réactions est très grand, il est difficile de calculer les termes sources. En effet, l'intégration des termes sources est très onéreuse en terme de temps CPU, en particulier pour les cinétiques "raides" où les temps caractéristiques de certaines réactions impliquent une limitation très forte du pas de temps. Il s'avère donc crucial de manipuler des mécanismes de taille relativement petite et de raideur raisonnable.

Une solution pour économiser du temps CPU est d'adapter le mécanisme détaillé à la situation ou à une gamme d'applications en appliquant une réduction du schéma cinétique. En effet, pour une application précise, l'intégralité du mécanisme n'est en général pas nécessaire.

Turanyi, dans la présentation de sa méthode de réduction [184], choisit de classer les espèces en trois catégories :

- espèce importante : espèce dont la reproduction du profil de concentration est un des objectifs de la simulation ;
- espèce nécessaire : espèce qui doit être présente dans le mécanisme pour fournir un profil correct pour les espèces importantes et pour reproduire des grandeurs globales telles que le délai et température limite d'auto-inflammation, vitesse de flamme ;
- espèce redondante : il s'agit d'une espèce pouvant être éliminée du mécanisme sans perturber notablement les résultats des simulations.

Une recherche des espèces et des réactions redondantes aboutit à un nouveau mécanisme réduit. Il s'agit ici de la première catégorie de réduction, basée sur l'importance des espèces et des réactions pour atteindre l'objectif. La seconde catégorie est basée sur les échelles de temps. Dans la plupart des cas, ces deux catégories sont utilisées successivement. La première étape

de la réduction consiste à enlever les espèces et réactions non nécessaires dans les conditions d'application souhaitées et obtenir ainsi un mécanisme squelettique. Dans une seconde étape, les modèles basés sur des analyses d'échelle de temps sont utilisés.

La réduction d'un mécanisme s'effectue en fonction de cibles choisies par l'utilisateur. Ces cibles peuvent être des caractéristiques chimiques que le mécanisme réduit doit reproduire dans un certain domaine de conditions initiales.

Seule la méthode Direct Related Graph with Error Propagation (DRGEP) est ici présentée. Il s'agit de la méthode retenue pour la réalisation d'un nouveau schéma cinétique pour la combustion propane/air.

4.2.1 Présentation des méthodes DRG et DRGEP

La méthode DRGEP repose sur la méthode Direct Related Graph (DRG). Cette méthode, à la base de nombreux développements, a été introduite en 2005 par Lu [110]. Elle repose principalement sur les relations qui existent entre les espèces. Afin de déterminer ces relations, une base de données est réalisée grâce aux résultats de quelques cas simples mais pertinents, à l'aide du mécanisme détaillé.

Un coefficient d'interaction direct, r_{AB} , introduit ci-dessous donne la contribution normalisée de l'espèce B au taux de production de l'espèce A ,

$$r_{AB} = \frac{\sum_{j=1,J} |\nu_{A,j} Q_j \delta_B^j|}{\sum_{j=1,J} |\nu_{A,j} Q_j|}, \quad (4.1)$$

avec J le nombre d'équations réversibles du mécanisme, et Q_j le taux de réaction de la réaction j dont l'expression est donnée dans l'équation (3.84).

Le coefficient δ_B^j est défini selon :

$$\delta_B^j = \begin{cases} 1, & \text{si la réaction } j \text{ implique l'espèce B,} \\ 0, & \text{autrement} \end{cases} \quad (4.2)$$

Un seuil de tolérance est ensuite défini. Tous les coefficients inférieurs à ce seuil sont alors négligés.

A partir du coefficient r_{AB} , une représentation graphique de ces relations, notée Directed Relation Graph (DRG), est réalisée. Les caractéristiques de ce graphe sont les suivantes :

- chaque espèce du mécanisme est représentée par un noeud ;
- une flèche va d'un noeud à l'autre si les espèces sont couplées ;
- la largeur de la flèche est fonction de l'importance du couplage.

Une illustration de cette représentation est donnée sur la figure. 4.1.

Des ensembles de dépendance sont ainsi créés entre les espèces. Dans un second temps, l'utilisateur décide des espèces de départ qu'il souhaite conserver dans le mécanisme réduit. Toutes les espèces dépendantes de celles-ci sont identifiées et incluses dans le mécanisme réduit, les autres sont éliminées. Toutes les réactions contenues dans le mécanisme détaillé qui ne contiennent aucune espèce du mécanisme squelettique sont exclues.

Cette évaluation présente le net avantage d'être rapide car elle n'est effectuée qu'une seule fois. Cependant, la même importance est accordée à chaque espèce conservée. De plus, les espèces peuvent être liées de manière directe comme représentées sur le graphe mais aussi de manière indirecte. Deux espèces A et B peuvent en effet contribuer à la formation d'une troisième espèce C , bien qu'elles ne soient présentes simultanément dans aucune réaction [184]. Dans de telles situations, le fait de retirer une espèce peut entraîner la disparition d'un groupe d'espèces.

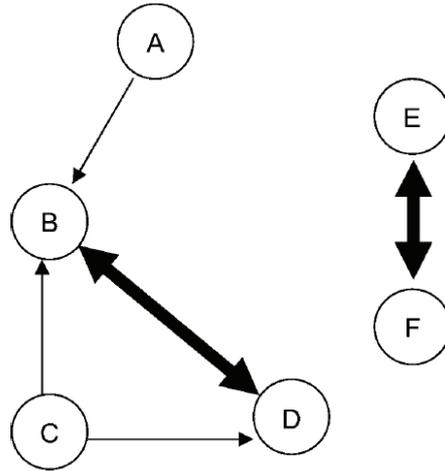


Fig 4.1 – Schéma typique d'un DRG montrant les relations existantes entre les espèces.

Afin de pallier ces inconvénients, des développements de la méthode précédente ont été réalisés au cours de ces dernières années. Une attention particulière a été portée à la méthode "Directed Relation Graph with Error Propagation" [136].

En regardant plus attentivement la définition du coefficient d'interaction direct donnée dans l'équation (4.1), on remarque qu'il s'agit d'une estimation de l'erreur faite sur la prédiction de l'espèce A si l'espèce B est négligée. Aucune distinction n'est faite entre le taux de production et de destruction. Cependant, l'erreur introduite en omettant une espèce qui contribue uniquement à la formation de A ou de manière équivalente à sa production et à sa destruction n'a pas du tout le même effet. L'objectif constitue ici en la réalisation d'un mécanisme contenant un minimum d'espèces dont l'erreur par rapport au mécanisme détaillé est inférieure à un certain seuil de tolérance sur les cibles choisies. Le fait de considérer une espèce indépendamment d'un groupe d'espèces retiré auquel l'espèce pourrait appartenir entraîne une mauvaise prédiction de l'importance de chaque espèce. En effet, lorsqu'une espèce est retirée, l'importance des espèces restantes dans le schéma est modifiée. C'est pourquoi la méthode DRGEP intervient premièrement dans ce sens, en donnant une nouvelle définition des coefficients directs, plus adaptée à ce type de réactions,

$$r_{AB,\{S\}} \equiv \frac{|\sum_{i=1,I} \nu_{i,A} \omega_i \delta_{B,\{S\}}^i|}{\max(P_A, C_A)}, \quad (4.3)$$

avec :

$$P_A = \sum_{i=1,I} \max(0, \nu_{i,A} \omega_i), \quad (4.4)$$

$$C_A = \sum_{i=1,I} \max(0, -\nu_{i,A} \omega_i), \quad (4.5)$$

où P_A et C_A sont respectivement le taux de production et le taux de destruction total de l'espèce A . $\{S\}$ désigne ici l'ensemble d'espèces déjà retiré. La définition du coefficient δ_B^i est aussi modifiée. Le coefficient prend la valeur 1 si la réaction i implique l'espèce B ou n'importe quelle espèce contenue dans $\{S\}$ et vaut 0 dans tous les autres cas.

Cette définition donne une meilleure estimation de l'erreur introduite en omettant un groupe d'espèces du mécanisme.

La deuxième amélioration apportée au modèle DRG provient de la prise en considération de la propagation d'erreur. Un exemple de ce principe est expliqué grâce au schéma 4.2. Ce schéma représente quatre espèces ainsi que les liens existant entre elles. En suivant le raisonnement de

la méthode DRG, le lien le plus faible est retiré en premier. Dans l'exemple, il s'agit du lien liant A et D . Intuitivement, le lecteur remarquera qu'enlever l'espèce C influera sur l'espèce B et donc l'espèce A mais que les coefficients étant très faibles, cela aura sûrement une influence moindre qu'enlever directement D .

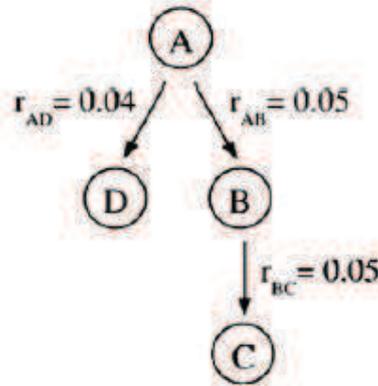


Fig 4.2 – Partie d'un DRG. Enlever C introduirait moins d'erreur sur A qu'enlever D bien que les espèces ne soient pas directement liées entre elles, extrait de [136].

Par conséquent, la méthode DRGEP propose de nouveaux coefficients afin de prendre en compte cette propagation d'erreur. A chaque chemin p reliant l'espèce A à l'espèce B , ces deux espèces n'étant pas forcément directement liées, est attribué un coefficient $r_{AB,p}$,

$$r_{AB,p} = \prod_{i=1}^{n-1} r_{S_i S_{i+1}}, \quad (4.6)$$

avec $S_1 = A$ et $S_n = B$.

Ce coefficient montre que plus le chemin entre les espèces A et B est long, moins l'erreur introduite sur l'espèce B aura une influence sur la prédiction de l'espèce A . L'espèce B sera retirée du mécanisme quand la valeur du seuil de tolérance sera supérieure au maximum des coefficients $r_{AB,p}$ pour tous les chemins p existants.

Le mécanisme résultant de cette simplification contient toutes les réactions où les espèces sauvegardées sont présentes. Cependant, toutes ces réactions ne sont pas nécessaires à la représentation précise du système. Les réactions ayant un impact minimal sur les cibles choisies sont retirées. L'impact des réactions est calculé à l'aide d'un coefficient similaire à celui utilisé pour les espèces.

Le mécanisme final est ainsi obtenu. Une étape supplémentaire résidant en l'identification des espèces en état quasi-stationnaire peut y être rajoutée. Celle-ci ne sera pas effectuée pour la réduction du mécanisme présentée dans la prochaine section.

4.2.2 Application de la méthode DRGEP

Le propane est le carburant choisi pour les simulations présentées dans cette thèse. Dans la littérature, on trouve de nombreux mécanismes détaillés décrivant la combustion propane/air. Ceux-ci comportent en général une centaine d'espèces [45, 86, 182]. Comme déjà indiqué dans le chapitre 3, une manière alternative de décrire la combustion est d'utiliser un schéma global comportant seulement une ou deux réactions [183]. Cependant il est difficile de trouver des mécanismes semi-réduits situés à mi-chemin entre ces deux types de mécanisme (du point de

vue de la complexité). Un mécanisme décrivant la combustion propane/air, contenant 29 espèces et 73 réactions, a été utilisé dans quelques études [19, 20, 198]. Le problème de ce mécanisme réside en sa raideur, même si des modifications peuvent lui être apportées afin de l'adapter à certains cas [77].

Afin de remédier à ce problème, un mécanisme semi-réduit est ici développé. Ce dernier est réalisé afin d'être le plus adapté possible aux problématiques étudiées. Le but de ce nouveau schéma étant d'être utilisable dans le cadre de la chimie détaillée sous YALES2, son nombre d'espèces doit être le plus restreint possible afin de limiter le temps CPU.

Le mécanisme détaillé sur lequel la réduction est opérée est celui de Curran [45]. Il est composé de 116 espèces et de 1229 réactions. Ce mécanisme a été validé grâce à des études de tubes à choc [31, 94]. De plus, les vitesses laminaires de flammes prémélangées non étirées ont été calculées à la pression atmosphérique dans la gamme de richesse $0.4 < \varphi < 1.8$. Les valeurs obtenues ont été comparées aux données expérimentales mesurées sur des flammes jumelles à contre-courant [187].

La méthode DRGEP présentée dans la section précédente ainsi qu'un rassemblement des isomères [135] sont opérés dans le code FlameMaster, code de combustion zéro et une dimension.

Un mécanisme décrivant correctement la combustion propane/air et représentant la plupart des effets de la chimie complexe propres aux flammes stratifiées est développé. Une grande partie de nos études portant sur les vitesses de flamme, le critère principal servant à la réduction est la conservation de la vitesse laminaire. Le maintien de la température des gaz brûlés est aussi un critère retenu. La réduction est opérée à la pression atmosphérique et à une température de gaz frais égale à 300 K. Concernant le critère d'erreur maximum, il est fixé à 5%.

La réduction de schéma est basée sur des flammes planes en propagation libre dans un milieu laminaire. Afin d'assurer la validité du mécanisme sur une large gamme de richesse, cinq flammes de référence ont été choisies.

Les caractéristiques de ces flammes sont données dans la table 4.1 pour le mécanisme détaillé¹.

φ	0.6	0.9	1.0	1.1	1.2
$s_{l,d}$ (cm/s)	13.20	35.46	40.05	41.98	40.39
$T_{b,d}$ (K)	1701.07	2180.88	2268.23	2260.89	2190.53
$s_{l,r}$ (cm/s)	13.07	34.97	39.57	41.74	40.67
$T_{b,r}$ (K)	1700.82	2183.23	2271.20	2261.72	2190.52

Tableau 4.1 – Principales caractéristiques des flammes de référence, obtenues avec le schéma détaillé (indice d) et avec le schéma réduit (indice r).

Le schéma réduit obtenu contient 31 espèces et 118 réactions. Ce dernier est représenté en annexe A.

4.2.3 Validation du schéma réduit

Les cinq flammes de référence utilisées pour la réduction du schéma cinétique sont maintenant calculées avec le mécanisme réduit grâce au code de chimie détaillée Cantera [34]. Les nouvelles caractéristiques de ces flammes sont présentées dans la table 4.1.

1. La composition de l'air choisie pour le calcul de ces flammes est : $Y_{O_2} = 0.2321$ et $Y_{N_2} = 0.7679$.

En comparant ces caractéristiques aux caractéristiques détaillées, on observe une erreur maximale de 1.5%. Cette valeur est bien inférieure à l'erreur maximale autorisée lors de la réduction du schéma.

L'épaisseur dite thermique du front de flamme, δ , est aussi calculée pour ces flammes avec les deux mécanismes,

$$\delta = \frac{T_2 - T_1}{\max\left(\left|\frac{\partial T}{\partial x}\right|\right)}. \quad (4.7)$$

Les résultats obtenus sont donnés dans la table 4.2.

φ	0.6	0.9	1.0	1.1	1.2
$\delta_d(\mu\text{m})$	777.08	403.47	376.16	357.77	356.19
$\delta_r(\mu\text{m})$	782.56	407.14	385.74	358.16	352.92

Tableau 4.2 – Epaisseurs thermiques des flammes de référence calculées avec le schéma détaillé (indice d) et le schéma réduit (indice r).

L'épaisseur du front de flamme est conservée lors de la réduction du schéma cinétique. Cette épaisseur de flamme permet d'avoir une bonne approximation de la discrétisation spatiale nécessaire pour le maillage. Un minimum de 8 points dans la flamme paraît raisonnable pour obtenir une bonne description du front réactif. Pour la flamme la plus fine, cette contrainte implique des mailles de $40 \mu\text{m}$. Cette condition sera validée dans la section 4.2.4.

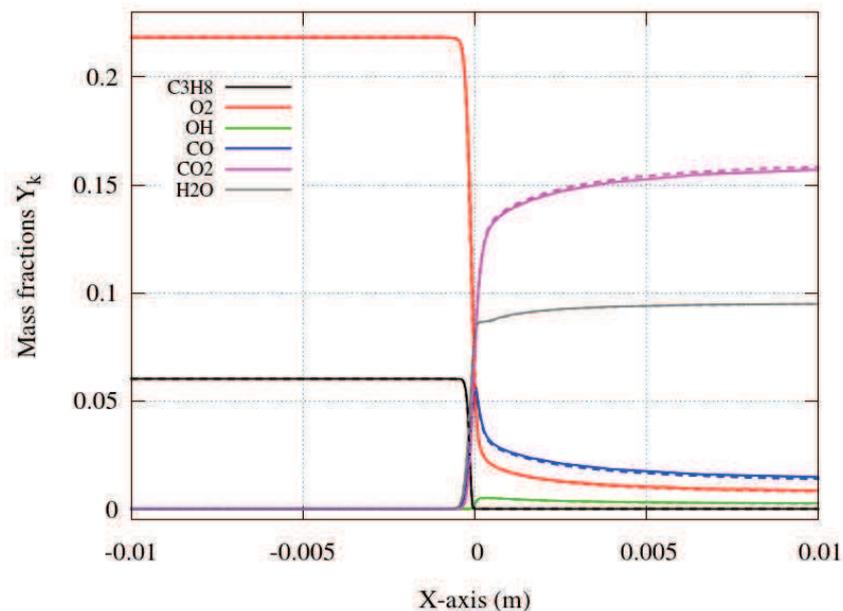


Fig 4.3 – Comparaison des profils des espèces majoritaires obtenus avec le schéma détaillé, traits pleins, et le schéma réduit, traits pointillés, pour la flamme stœchiométrique.

Les profils de fraction massique des espèces majoritaires, à savoir C_3H_8 , O_2 , OH , CO , CO_2 et H_2O , sont observés pour la flamme stœchiométrique réalisée avec le schéma détaillé et le schéma réduit. Ils sont représentés sur la figure 4.3.

Les traits sont quasiment superposés. On note tout de même une très légère différence sur la formation de CO_2 et de CO . Les espèces majoritaires sont bien prédites par le nouveau mécanisme.

Le principal critère retenu pour cible étant la conservation de la vitesse laminaire, celui-ci est analysé. Une comparaison de la vitesse laminaire en fonction de la richesse est réalisée entre le schéma détaillé, le schéma réduit et des résultats expérimentaux [24, 88, 117, 186]. Les différentes courbes obtenues sont représentées sur la figure 4.4.

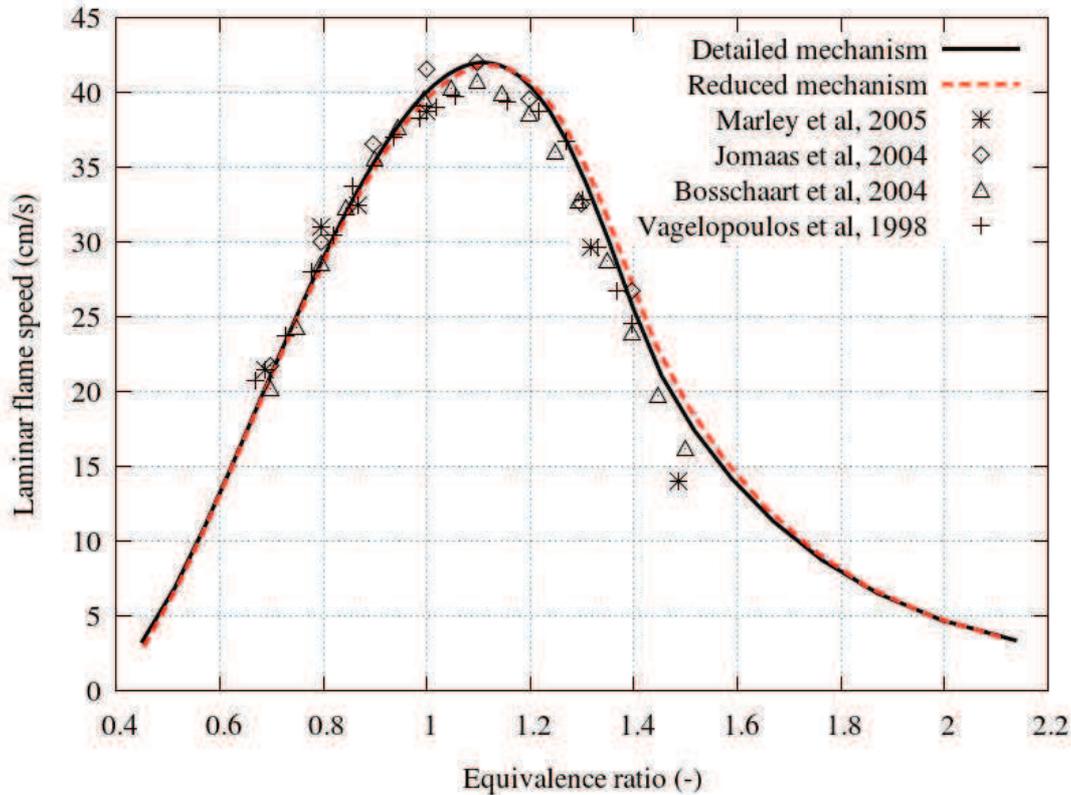


Fig 4.4 – Vitesse laminaire, s_L , en fonction de la richesse pour des flammes propane/air à température et pression standards. Comparaison entre données expérimentales (symboles) et résultats numériques avec le schéma détaillé, ligne continue, et le schéma réduit, ligne pointillée.

Les vitesses de flammes sont en accord avec les données expérimentales. A noter tout de même que pour les deux schémas cinétiques, la vitesse de flamme est légèrement surestimée dans la partie riche de la courbe.

Le nouveau mécanisme est donc particulièrement bien adapté aux études réalisées dans cette thèse. En effet, seul le comportement du front de flamme établi est observé. Cependant, il est important de noter que ce mécanisme ne peut pas être utilisé pour étudier les phénomènes d'auto-allumage, le délai d'auto-allumage ne faisant pas partie des cibles de la réduction. Par conséquent, des espèces oxygénées nécessaires à l'initialisation de certaines réactions ont été retirées et le délai d'auto-allumage n'est plus conservé.

4.2.4 Méthodologie pour son utilisation avec YALES2

L'insertion de la chimie complexe dans YALES2 est un travail en cours de réalisation. Pour l'instant, aucun modèle de sous-maille n'est instauré dans le code pour une telle modélisation de la chimie. Un maillage de type DNS doit donc être utilisé afin d'avoir des résultats de simulations corrects. De plus, la DNS permet de capturer tous les effets chimiques, nécessaires à la compréhension de la combustion stratifiée ou diluée.

Des flammes $1D$ à la richesse stoechiométrique sont réalisées avec différents paramètres. Le but est de déterminer le rôle de chaque paramètre ainsi que de trouver l'ensemble de paramètres optimal.

Un récapitulatif des flammes réalisées est présenté dans le tableau 4.3. Les vitesses de consommation obtenues y sont répertoriées. Pour des flammes $1D$ en propagation libre, la vitesse de consommation est égale à la vitesse laminaire. La vitesse laminaire obtenue pour une flamme stoechiométrique calculée avec Cantera est $s_L = 39.57 \text{ cm/s}$. Les temps de simulation mono-processeur par milli-seconde physique calculée sont aussi donnés dans ce tableau. Pour ces derniers, il est important de rappeler que des intégrateurs raides sont utilisés, plus précisément la librairie CVODE [42]. De plus, le répartiteur de charge, permettant de distribuer plus équitablement la charge de calcul sur chacun des processeurs et d'optimiser les temps d'attente, détaillé en annexe C, est actionné.

CFL	Discrétisation spatiale (μm)	Type de diffusion	Vitesse de consommation (cm/s)	Erreur relative (%)	Temps CPU par ms (s)
0.4	40	Implicite	38.23	3.39	1399.33
0.2	40	Implicite	38.91	1.67	2226.40
0.1	40	Implicite	38.89	1.72	3183.46
0.1	80	Implicite	38.77	2.02	931.70
0.1	40	Implicite	38.89	1.72	3183.46
0.1	20	Implicite	38.80	1.95	13844.80
0.1	40	Implicite	38.89	1.72	3183.46
0.1	40	Explicite	38.85	1.82	50122.47

Tableau 4.3 – Etude paramétrique sur des flammes $1D$ stoechiométriques réalisées avec YALES2 et le schéma réduit.

En ce qui concerne le CFL utilisé, on remarque que plus celui-ci est petit, plus la vitesse laminaire obtenue est proche de celle donnée par Cantera. Ce résultat est logique et s'explique par le fait que la diffusion est implicite pour ces cas. Le pas de temps est limité par la convection. Si l'ordre de grandeur entre le pas de temps convectif et le pas de temps diffusif est trop important, l'erreur introduite sur la vitesse de consommation est plus importante. Afin d'utiliser la diffusion implicite tout en gardant une précision relative, il est important de limiter le pas de temps et par conséquent de réduire le CFL. Le CFL est pris égal à 0.1.

Une fois le CFL choisi, une étude en discrétisation spatiale est effectuée. Un maillage possédant une discrétisation spatiale égale à $80 \mu\text{m}$ est plus rapide en terme de temps CPU mais donne une vitesse de consommation trop faible. Pour des discrétisations spatiales égales à $40 \mu\text{m}$ et $20 \mu\text{m}$, la différence entre les vitesses laminaires obtenues est moindre. Cependant, le temps de calcul pour le maillage discrétisé à $20 \mu\text{m}$ est presque quatre fois supérieur en $1D$ à celui du maillage possédant des mailles de $40 \mu\text{m}$. Le but étant de réaliser des simulations dans des temps CPU corrects, un maillage de $40 \mu\text{m}$ paraît un bon compromis entre vitesse de flamme et temps de calcul.

Une dernière comparaison est effectuée avec les paramètres choisis. L'influence de l'implicitation de la diffusion est observée. Les résultats obtenus montrent que la vitesse laminaire calculée diffère peu lorsque la diffusion est implicite. On remarque aussi que l'implicitation de la diffusion permet un calcul 15 fois plus rapide. Cette dernière observation montre bien la nécessité de

l'implication de la diffusion dans les calculs.

L'influence sur les vitesses de flamme ayant été analysée, les profils des espèces majoritaires peuvent maintenant être examinés. Ceux-ci sont représentés sur les figures 4.5, 4.6 et 4.7.

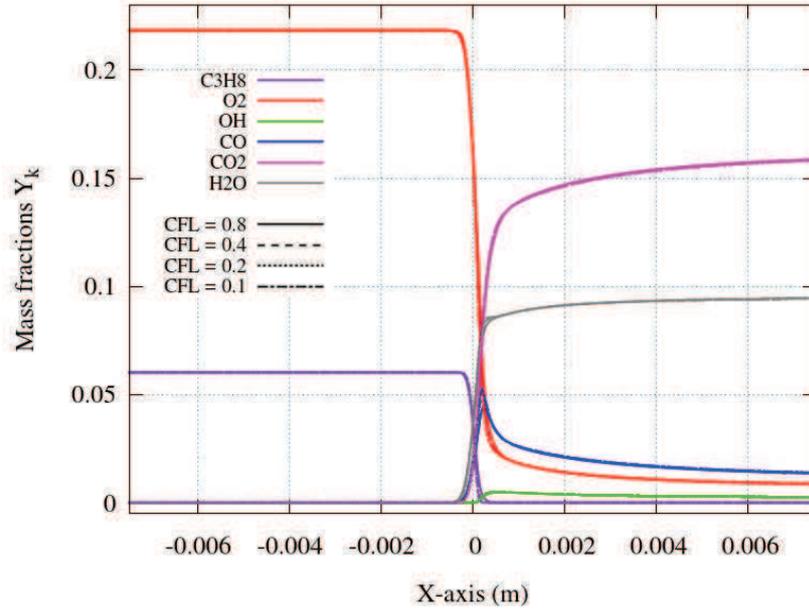


Fig 4.5 – Profils des espèces majoritaires obtenus pour une discrétisation spatiale de $40 \mu\text{m}$ avec différents CFL.

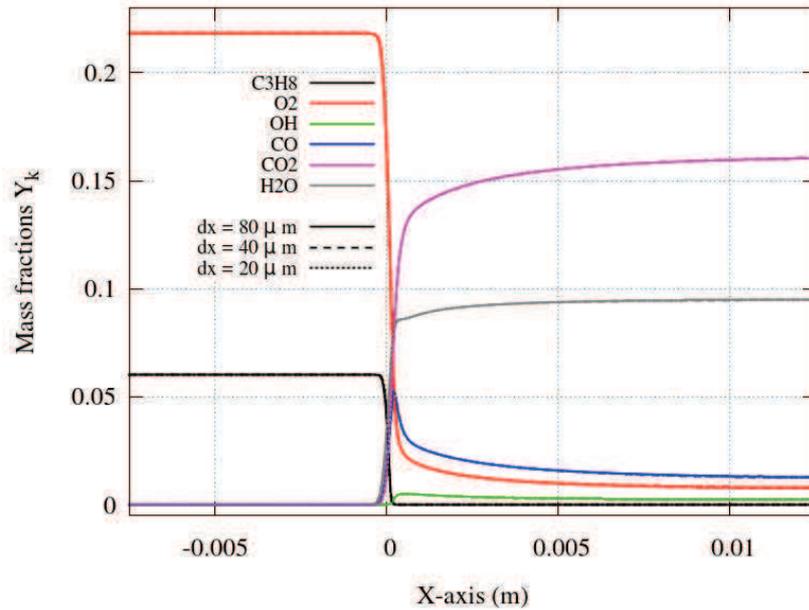


Fig 4.6 – Profils des espèces majoritaires obtenus avec un CFL égal à 0.1 pour différentes discrétisations spatiales.

Ces trois figures montrent que quels que soient la discrétisation spatiale, le CFL ou le type de diffusion choisis, peu de différences sont présentes sur les profils d'espèces. Les courbes, alignées sur un point fixe de température, se superposent presque parfaitement. Les différents paramètres influent sur la vitesse de flamme mais ne modifient que très marginalement les profils d'espèces.

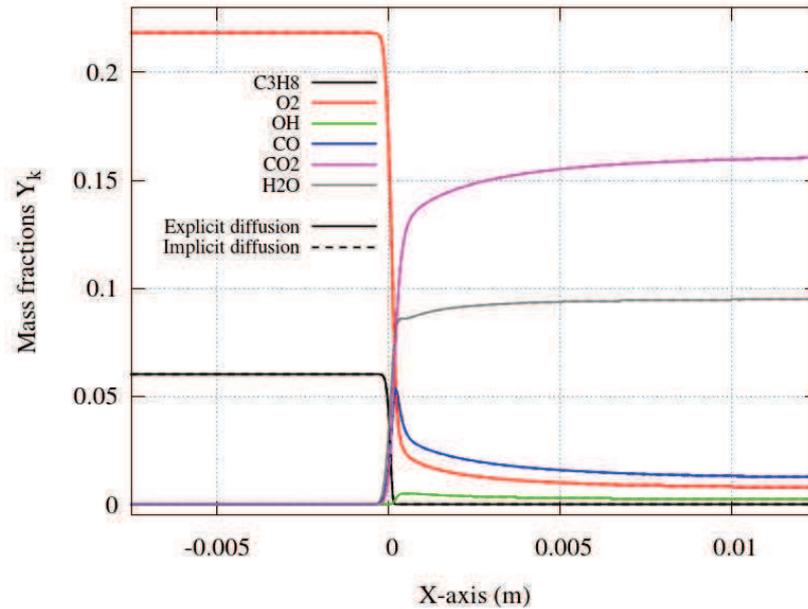


Fig 4.7 – Profils des espèces majoritaires obtenus avec une discrétisation spatiale de $40 \mu\text{m}$, un CFL égal à 0.1 calculé avec une diffusion implicite ou explicite.

L'ensemble de paramètres $\delta x = 40 \mu\text{m}$, $\text{CFL}=0.1$ et une diffusion implicite sera utilisé pour tous les calculs réalisés en chimie complexe.

4.2.5 Variable de progrès et génération de la table chimique

Pour les simulations en chimie complexe, il est d'usage, en suivant la convention de type Cantera ou CHEMKIN de fournir un (ou plusieurs) fichiers contenant les éléments et les espèces chimiques ainsi que l'ensemble des réactions du mécanisme considéré. De plus, les compositions locales des différents mélanges présents dans le domaine doivent être connues puisqu'elles doivent être renseignées en tant que conditions initiales du calcul.

Les simulations réalisées en chimie tabulée demandent, quant à elles, une table chimique où les propriétés de la flamme sont tabulées en fonction de deux variables qui sont les variables transportées, en général la fraction de mélange Z et la variable de progrès C .

Le même schéma cinétique est utilisé pour toutes les simulations afin d'obtenir des résultats pouvant être comparés. Il a été vu, section 3.4.4.2, que la variable de progrès doit évoluer de manière monotone entre 0 et 1. Dans un premier temps, $Y_C = Y_{CO} + Y_{CO_2}$ a été choisie. Il s'agit en effet d'une formulation proposée pour le méthane, qui est l'hydrocarbure le plus simple [56, 156, 192]. Cette variable est bien adaptée pour la combustion d'un mélange pauvre. Cependant, il y a présence d'un point de rebroussement lorsque le mélange est trop riche. La figure 4.8 illustre cette difficulté en traçant la température en fonction de la variable de progrès pour deux flammes de richesse $\varphi = 0.95$ et $\varphi = 1.25$.

Des mélanges riches seront présents dans les simulations. En prenant $Y_C = Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H_2O}$, ce problème est résolu, comme illustré sur la figure 4.9.

Cette variable est ensuite normalisée,

$$C = \frac{Y_C}{Y_C^{eq}}, \quad (4.8)$$

où Y_C^{eq} correspond à la valeur à l'équilibre de Y_C pour le même mélange.

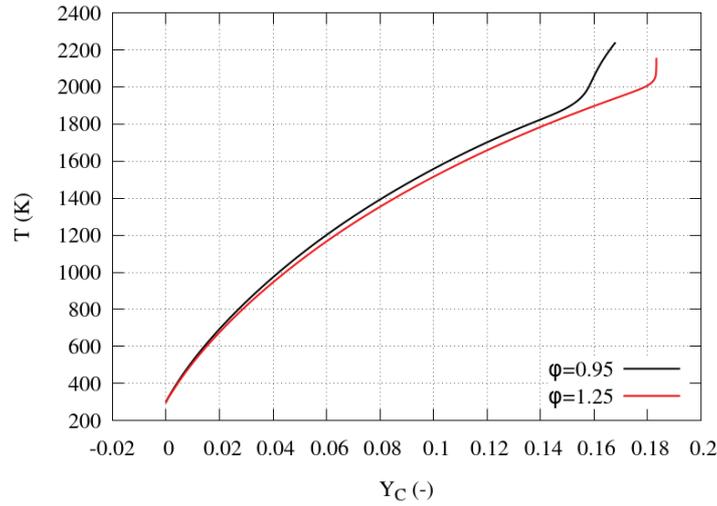


Fig 4.8 – Température en fonction de la variable de progrès $Y_C = Y_{CO} + Y_{CO_2}$, pour une richesse pauvre et une richesse riche. Un point de rebroussement est visible pour le mélange riche.

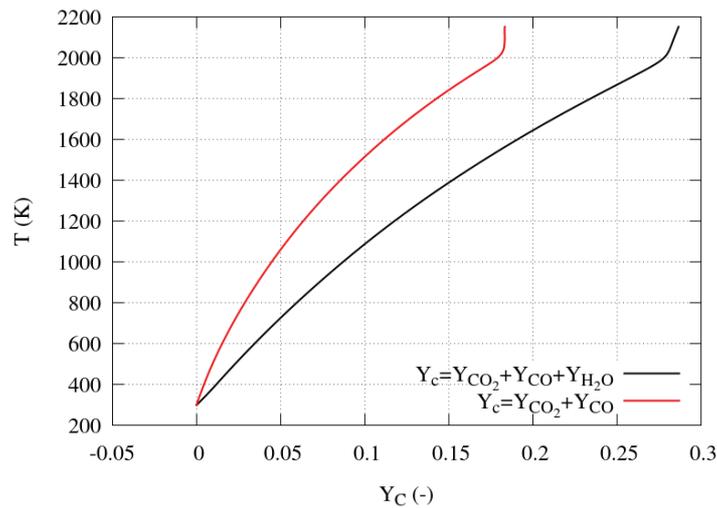


Fig 4.9 – Flamme 1D de richesse $\varphi = 1.25$. Température en fonction de la variable de progrès Y_C , pour deux définitions de Y_C . Lorsque H_2O est inclus dans la définition de Y_C , Y_C est bien monotone.

Les simulations étant toutes laminaires, et le maillage suffisamment fin, il est supposé qu'il n'y a ni variation de la variable de progrès ni variation de la fraction de mélange au sein d'une maille.

La table est réalisée à la pression atmosphérique pour une température initiale de 300 K. La variable de progrès est discrétisée de manière régulière et la fraction de mélange est centrée autour de la stœchiométrie. Un exemple de tabulation est représenté sur la figure 4.10.

4.3 Présentation des simulations

Le but de ce chapitre est de comprendre le comportement d'une flamme stratifiée laminaire. L'étude se limitera à des cas relativement simples. Le cas de la flamme "sphérique", ici en fait

C

T

Fig 4.10 – Tabulation de la température en fonction de la variable de progrès et de la fraction de mélange.

cylindrique car les simulations sont réalisées au mieux en deux dimensions, a été retenu pour répondre à ce critère. Ce type de flamme est bien documenté dans la littérature et étudié jusqu'à présent en milieu homogène [23, 74] et hétérogène [13, 133]. La propagation d'une flamme au sein de ces deux types de milieu sera analysée dans ce chapitre.

4.3.1 Cas étudiés

Afin de comprendre l'effet de la stratification sur le comportement de ces différents mélanges, il est intéressant de s'intéresser à la propagation de ce dernier au sein de différents mélanges. La dénomination des cas fait ici uniquement référence à leur richesse.

Les différentes compositions de mélange sont listées ci-dessous :

- C1.** Mélange homogène de richesse $\varphi = 0.6$.
- C2.** Mélange homogène de richesse $\varphi = 0.95$.
- C3.** Mélange stratifié de richesse pauvre $\varphi = 0.95$ à pauvre $\varphi = 0.6$.
- C4.** Mélange stratifié de richesse riche $\varphi = 1.2$ à pauvre $\varphi = 0.6$.

L'initialisation des cas dépendra de leur dimension et sera explicitée dans les sections 4.4.1 et 4.5.1.2. Dans tous les cas, la température des gaz frais est fixée à $T_{fg} = 300$ K et la pression est égale à $P = 1$ atm. Chaque cas est simulé en une et en deux dimensions, à chaque fois avec les deux modèles de chimie (chimie détaillée et chimie tabulée par la méthode FPI).

Les vitesses laminaires de flamme non étirée des richesses étudiées déterminées avec Cantera sont répertoriées dans la table 4.4.

Cette table montre que la vitesse laminaire du mélange le plus pauvre, $\varphi = 0.6$, est très sensiblement inférieure à celle des deux autres mélanges. Les vitesses laminaires des mélanges de richesse $\varphi = 0.95$ et $\varphi = 1.2$ sont relativement proches et peuvent être utilisées pour discriminer les effets chimiques des effets dynamiques.

φ	s_L (cm/s)
0.6	13.07
0.95	37.53
1.2	40.07

Tableau 4.4 – Vitesse de flamme laminaire des richesses étudiées, déterminées avec Cantera.

4.3.2 Etablissement du noyau de flamme

L'évolution du noyau de flamme est fortement dépendante des conditions initiales qui lui ont été imposées ainsi que du mélange dans lequel il évolue. Ainsi, s'il n'est pas primordial d'initialiser de la façon la plus réaliste possible un noyau évoluant dans un milieu homogène stationnaire, l'initialisation devient par contre cruciale pour une flamme évoluant dans un milieu hétérogène ou instationnaire.

De précédentes études expérimentales [96] décrivent l'initialisation d'un noyau de flamme propane/air pour un allumage par électrodes. Celle-ci se compose de deux étapes. Tout d'abord, une explosion a lieu pendant une durée assez courte [6, 115] donnant naissance à un noyau d'allumage. Après cela, le développement du noyau de flamme est dominé par les effets diffusifs [48, 89].

L'initialisation du noyau de flamme en chimie tabulée ne s'avère pas être une difficulté. En effet, seule la valeur de la variable de progrès indique la présence ou non de gaz brûlés. Un dépôt particulier d'énergie n'est donc pas réalisable. La taille et la forme du noyau de flamme sont les seuls paramètres sur lesquels l'utilisateur puisse jouer. La limitation de la chimie tabulée présente paradoxalement un avantage, dans le sens où elle permet une initialisation simple de la flamme.

Des difficultés ont par contre été rencontrées au cours de la thèse lors de la recherche de la procédure d'initialisation du noyau pour la chimie complexe. Le transport de chaque espèce étant pris en compte dans ce modèle de chimie, toutes les fractions massiques doivent être renseignées. Il en est de même pour l'enthalpie sensible. Cette initialisation est en général réalisée au moyen de données préliminaires sur le mélange, déterminées au préalable à l'aide de codes de chimie détaillée, ici Cantera [34].

Le calcul des termes sources est inhérent à la simulation. Le noyau se réduit à une composition de gaz brûlés à une température élevée.

Si aucune modification numérique n'est apportée, la taille du noyau devient alors un point capital. En effet, des simulations 2D de propagation en milieu homogène ont montré que si le rayon du noyau est trop petit, les réactions n'ont pas le temps nécessaire pour se mettre en place et le noyau s'éteint progressivement. Lorsque le rayon du noyau est suffisamment grand, typiquement supérieur à 3 mm, la présence de chaleur, de combustible et de comburant provoque la mise en route des réactions et le noyau peut ensuite se propager. Dans ce cas, le noyau chaud commence à se réduire pour ensuite se développer grâce à la combustion qui prend place à l'interface gaz frais/gaz brûlés. Cependant, un noyau de rayon initial 3 mm perturberait la stratification présente dans les cas étudiés dans ce chapitre. En outre, les phénomènes physiques se déroulant pendant sa réduction et en particulier la mise en place des termes sources modifieraient notablement les propriétés de la future flamme. C'est pourquoi une méthodologie servant à allumer un noyau de flamme en chimie complexe est décrite ci-après.

Le noyau doit s'établir au sein d'un mélange homogène pour que l'intégralité des phénomènes dus à la stratification puisse ensuite être observée. Trois flammes planes laminares en propa-

gation libre de richesse $\varphi = 0.6$ pour le cas *C1*, $\varphi = 0.95$ pour les cas *C2* et *C3* et $\varphi = 1.2$ pour le cas *C4* sont préalablement calculées avec Cantera. Les fractions massiques correspondant aux fractions massiques des gaz brûlés sont mises en entrée de la simulation sur un noyau de longueur/rayon 0.7 mm, en fonction du nombre de dimension de la simulation. La température permet de déterminer l'enthalpie sensible lui étant liée. La transition de l'état gaz brûlés à gaz frais, des fractions massiques d'espèce et de l'enthalpie sensible pour les cas de chimie complexe et la variable de progrès pour les cas en chimie tabulée, est réalisée à l'aide de profils en tangente hyperbolique.

Cet état de mélange et d'enthalpie est forcé pendant une durée de 0.5 ms. Les flux de chaleur ainsi que les termes sources ont ainsi le temps de s'établir. Cette période peut être assimilée au dépôt d'énergie nécessaire à l'allumage expérimental.

4.4 Propagation mono-dimensionnelle

Dans un premier temps, les flammes mono-dimensionnelles sont réalisées et analysées. En effet, celles-ci présentent l'avantage de ne pas être soumises à l'étirement. Les résultats trouvés ici pourront permettre de déterminer l'influence de l'étirement lorsque les cas *2D* seront analysés.

4.4.1 Présentation de la configuration

Avant d'étudier des flammes bi-dimensionnelles, les effets de la stratification sont observés sur des flammes mono-dimensionnelles.

Le domaine de calcul a une longueur de 20 cm. La flamme peut se propager librement pendant un temps long sans être influencée par les bords du domaine. La méthodologie présentée dans la section 4.2.4 a montré qu'une discrétisation spatiale de $40 \mu\text{m}$ était nécessaire pour capturer correctement le front de flamme. Il s'agit de la discrétisation permettant d'obtenir un bon compromis entre temps de calcul et prédiction de la vitesse de flamme laminaire. Cette discrétisation est uniforme sur l'ensemble du domaine.

Les conditions initiales ainsi que les conditions limites sont maintenant présentées. Pour les cas *C3* et *C4*, le mélange le plus riche est imposé sur les deux premiers millimètres à gauche du domaine. La transition entre le mélange le plus riche et le mélange le plus pauvre est effectuée à l'aide d'un profil de tangente hyperbolique d'épaisseur 0.5 mm. Le passage entre les deux mélanges se fait donc de manière assez "brutale". Cette variation brusque doit permettre de mieux visualiser l'influence de la diffusion des espèces.

La partie gauche du domaine représente l'endroit où le noyau initial sera présent. La condition limite de mur y est imposée. Les gaz brûlés sont bloqués et la flamme se propage le long de la direction de la stratification. La partie droite représente l'extérieur du domaine, et une condition limite de sortie y est imposée.

Un profil de la richesse est représenté sur la figure 4.11 pour les différents cas.

Une vitesse de fluide initiale est imposée dans la totalité du domaine. La vitesse est mise à zéro dans les gaz brûlés puis imposée à une valeur donnée. Ces vitesses correspondent aux vitesses absolues obtenues après plusieurs milli-secondes de propagation dans un milieu homogène, et sont donc fonction de la richesse locale, table 4.5.

φ	0.6	0.95	1.2
u (m/s)	0.6	2.5	2.0

Tableau 4.5 – Récapitulatif des vitesses servant à l'initialisation des cas *1D*.

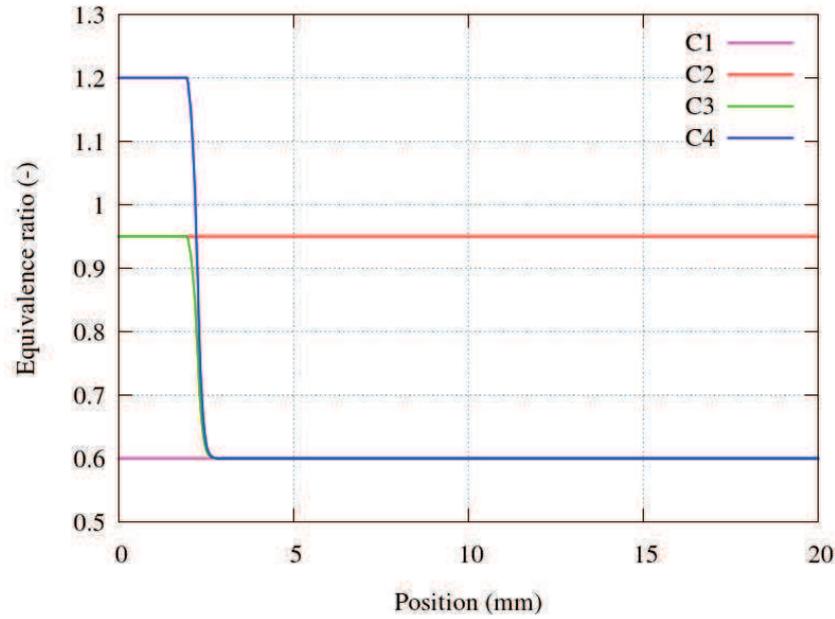


Fig 4.11 – Profils initiaux de richesse pour les différents cas.

Des cas tests ont montré que cette vitesse pouvait être choisie de manière arbitraire. La propagation de la flamme semble en effet indépendante de celle-ci.

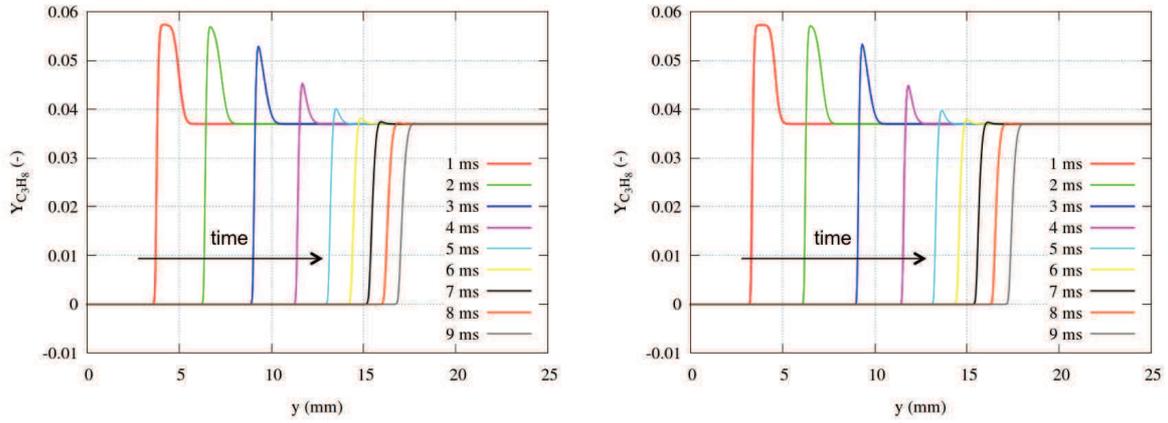
La procédure d'initialisation présentée auparavant entraîne un décalage temporel des simulations faites avec les deux modèles de chimie. En effet, le noyau n'est libéré qu'après 0.5 ms en chimie complexe alors qu'il se propage directement en chimie tabulée. De ce fait, $t = 0$ ms est pris comme le début de la simulation en chimie tabulée. Pour les cas réalisés avec la chimie complexe, $t = 0$ ms correspond à l'instant auquel le noyau peut se propager librement (soit $t_{simu} = 0.5$ ms).

4.4.2 Evolution des fractions massiques

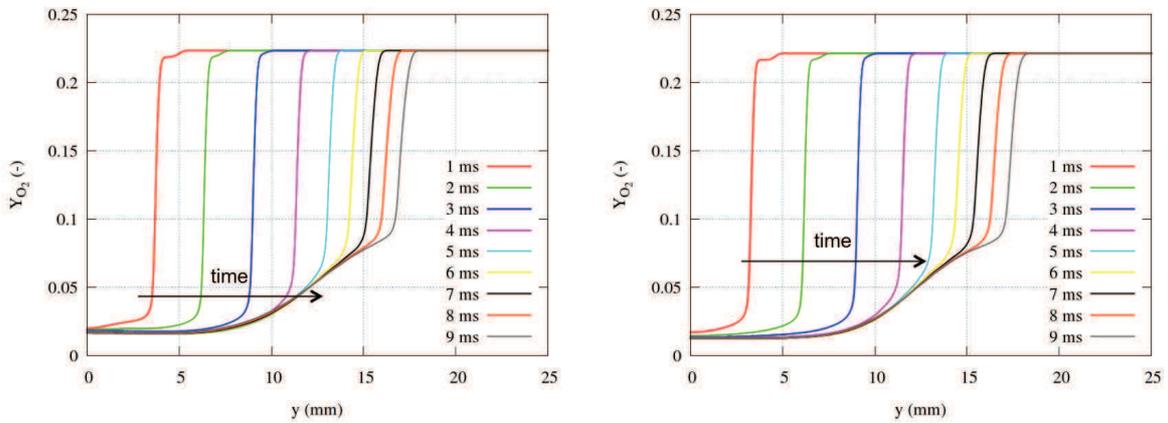
L'évolution temporelle des fractions massiques pour les cas stratifiés est observée. Celle des espèces principales est donnée sur les figures 4.12 et 4.13 pour les cas *C3* et *C4* respectivement.

Pour les deux cas, l'évolution de chaque espèce est très similaire entre la chimie complexe et la chimie tabulée. Ce résultat était attendu pour le cas *C3* où la stratification se fait d'un mélange pauvre vers un mélange pauvre. Cependant, pour le cas *C4*, un effet de diffusion différentielle de certaines espèces non brûlées telles que H_2 pouvait être attendu. Deux possibilités s'ouvrent ici : soit la chimie tabulée est capable de prendre en compte cet effet, soit cet effet n'est pas ou très peu présent dans cette flamme. La table chimique a en effet été générée en prenant en compte la diffusivité de chaque espèce, cependant, seules deux variables sont ensuite transportées au cours de la simulation. Par conséquent, seule la diffusion différentielle dans la direction normale à la flamme est prise en compte. De plus, cette diffusion différentielle est liée au caractère stationnaire de la flamme. La modification de la composition du gaz par la stratification n'entre pas en considération. Les flammes entrées dans la table sont en effet des flammes laminares homogènes non étirées. La moindre déviation à ces conditions entraîne des écarts au résultat exact. Pour la chimie complexe, les coefficients de diffusion sont recalculés à chaque pas de temps. Tous les effets instationnaires ainsi que le passé de la flamme sont pris en compte.

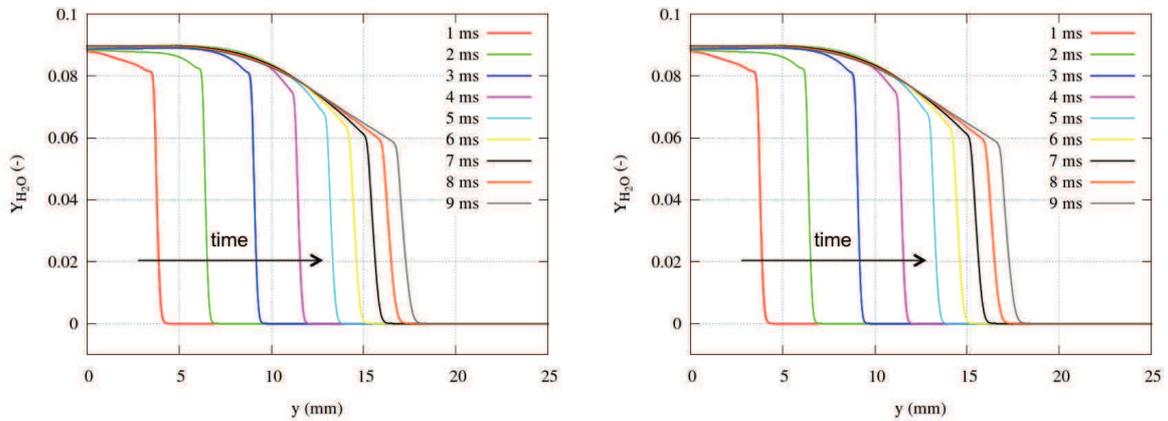
Pour le cas *C4*, une différence est tout de même notable pour le dioxyde de carbone. L'augmentation de celui-ci se fait un peu plus tôt en chimie complexe qu'en chimie tabulée. Cependant, la valeur maximale atteinte est la même. Il s'agit d'ailleurs de la seule espèce représentée dont



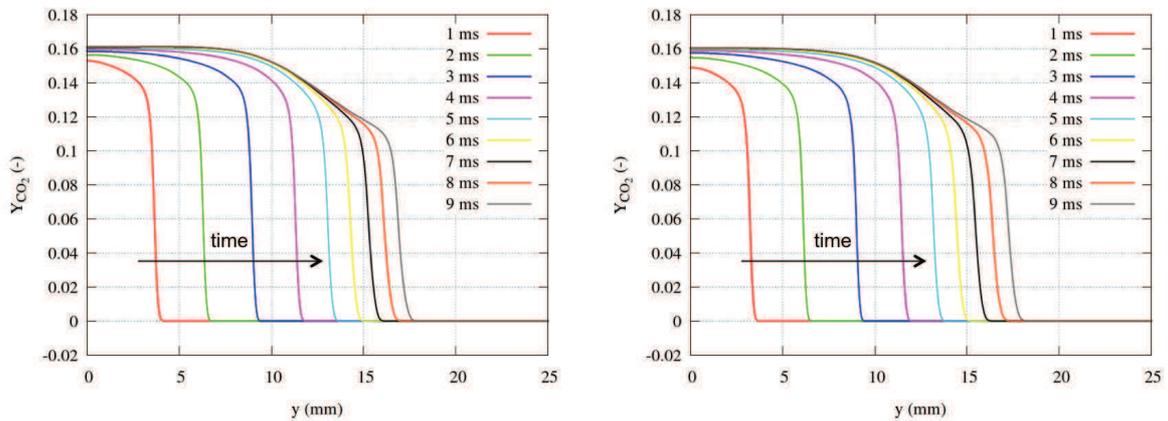
(a) Fraction massique du propane



(b) Fraction massique du dioxygène

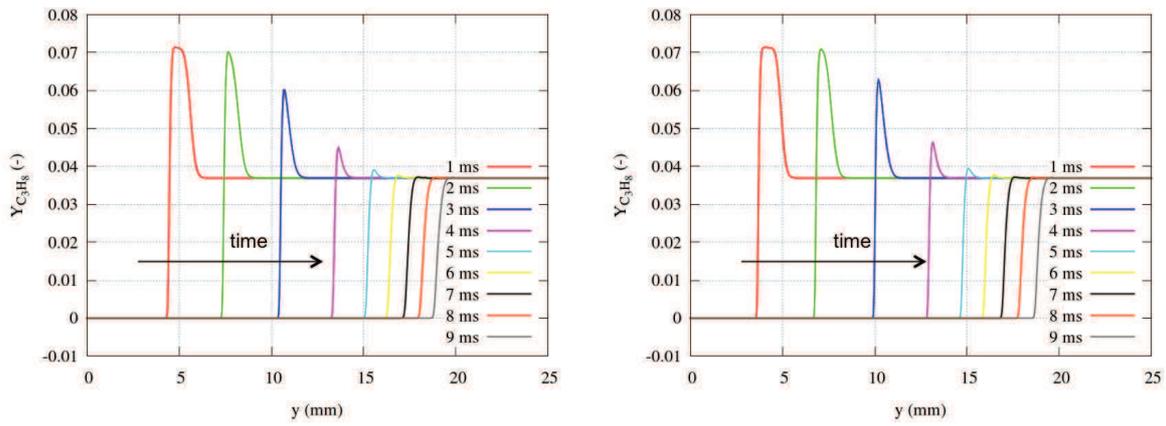


(c) Fraction massique de l'eau

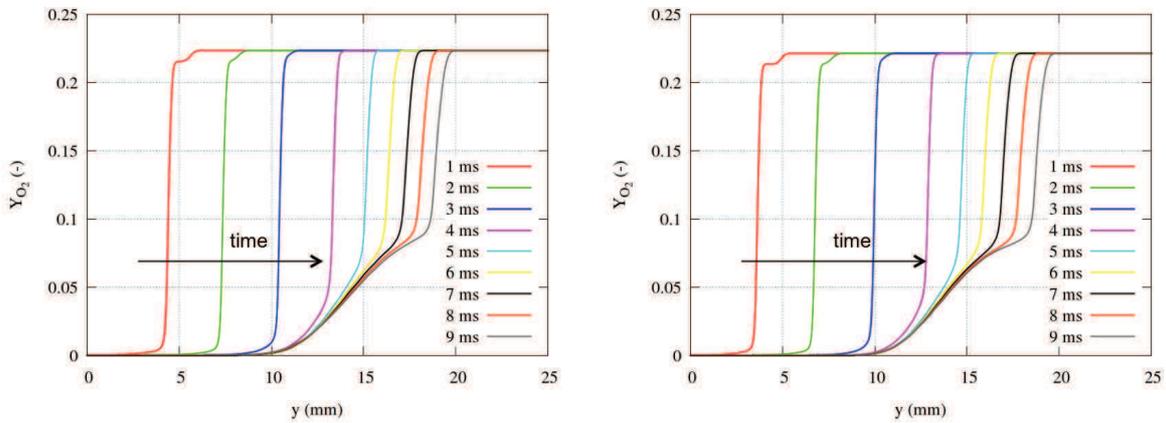


(d) Fraction massique du dioxyde de carbone

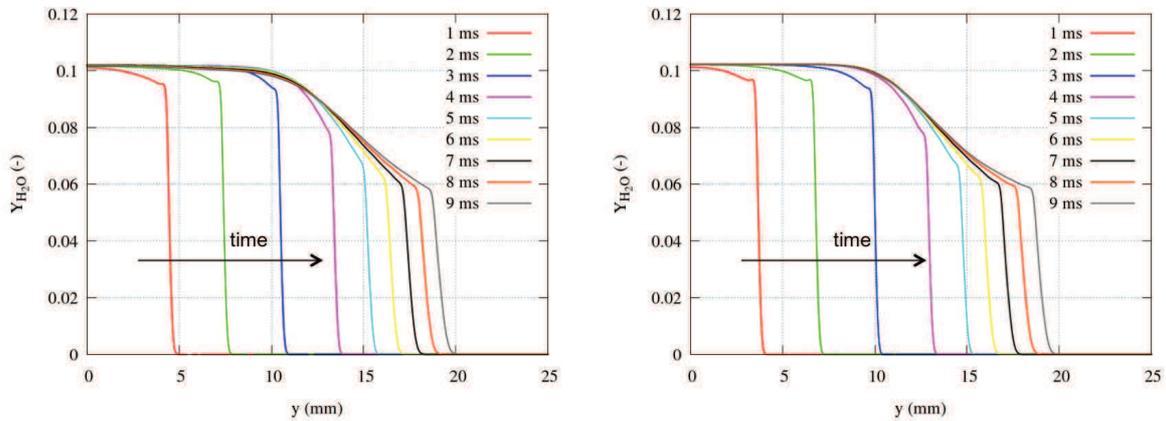
Fig 4.12 – Evolution temporelle des principales fractions massiques pour le cas C3. Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.



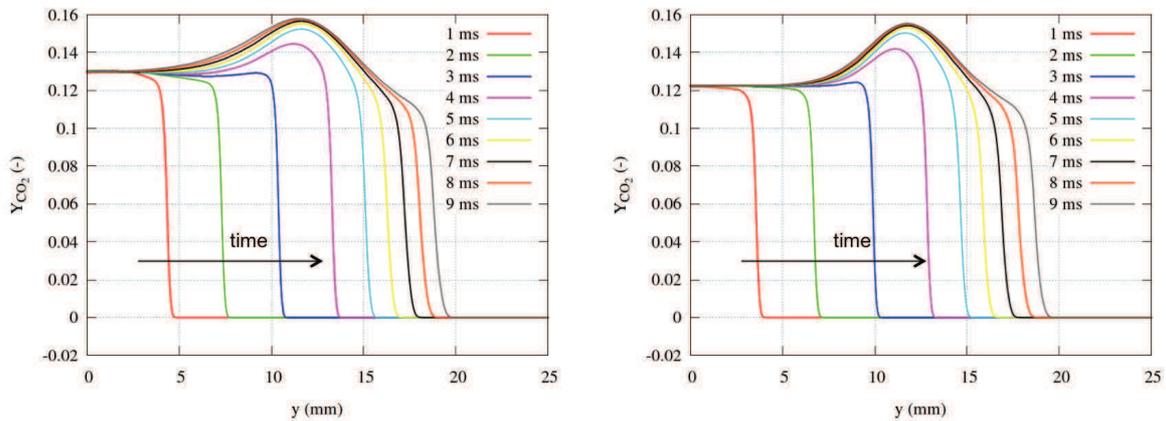
(a) Fraction massique du propane



(b) Fraction massique du dioxygène



(c) Fraction massique de l'eau



(d) Fraction massique du dioxyde de carbone

Fig 4.13 – Evolution temporelle des principales fractions massiques pour le cas *C4*. Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.

le comportement diffère entre le cas *C3* et le cas *C4*. Dans le cas *C3*, le dioxyde de carbone est le plus important dans les gaz brûlés, durant les premières milli-secondes, soit quand le mélange propane/air est le plus riche avec une valeur proche de $Y_{CO_2} = 0.16$. Cette valeur a tendance à diminuer lorsque le mélange s'appauvrit. Elle tend vers $0.11 < Y_{CO_2} < 0.12$. Dans le cas *C4*, le taux de dioxyde de carbone commence à augmenter à partir de 3 ms. Il atteint sa valeur maximale. Cette augmentation est due à la transition de richesse de la flamme. La figure 4.14 représente la fraction finale de dioxyde de carbone obtenue pour des flammes 1D de richesses différentes. Le pic de CO_2 est présent pour des flammes légèrement pauvres. Lors de la transition de richesse du cas *C4*, la fraction massique de dioxyde de carbone augmente d'abord pour atteindre sa valeur maximale avant de redescendre lorsqu'elle rencontre des mélanges plus pauvres.

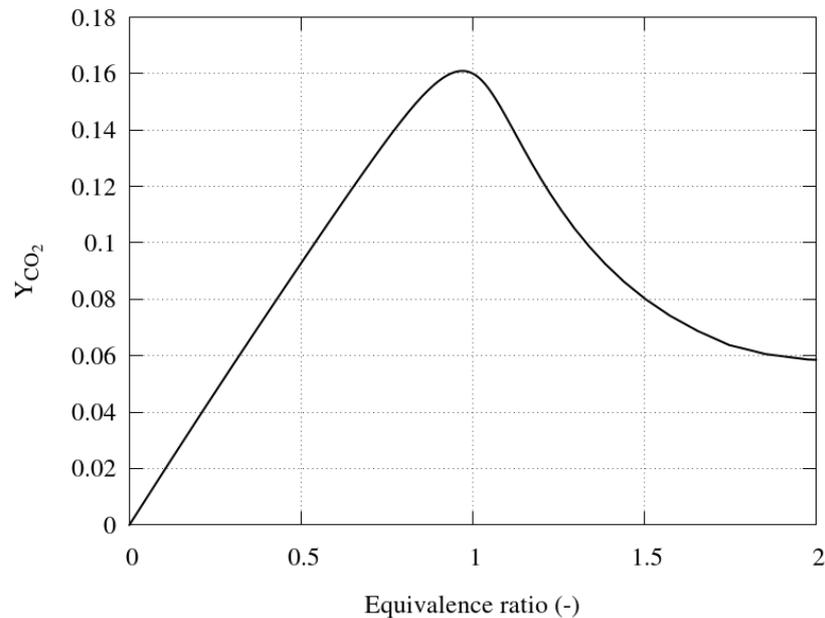


Fig 4.14 – Fraction finale de CO_2 en fonction de la richesse.

De plus, le temps pour atteindre le mélange pauvre ne semble pas être dépendant du gradient de richesse initial. Pour les cas *C3* et *C4*, la fraction massique de propane qui correspond au mélange le plus pauvre de richesse $\varphi = 0.6$, soit $Y_{C_3H_8} = 0.036$, est atteinte après 7 ms.

Afin de vérifier cette hypothèse, l'évolution de la valeur maximale de la fraction massique de propane est observée, figure 4.15.

Pour chaque cas, la décroissance entre chimie tabulée et chimie complexe est très proche. Un léger écart est visible pour le cas *C4* mais celui-ci reste minime.

Les courbes des deux cas se rejoignent aux environs des 5 ms pour atteindre le mélange pauvre à 7 ms.

En une dimension, le temps de décroissance semble donc indépendant du degré de stratification. Ce temps de décroissance peut être estimé à l'aide de l'épaisseur du gradient de stratification, δ_Z ,

$$\delta_Z = \frac{(Z_{max} - Z_{min})}{|\nabla Z|_{max}}, \quad (4.9)$$

qui vaut $\delta_Z = 434 \mu m$ et $\delta_Z = 432 \mu m$ pour les cas *C3* et *C4* respectivement.

Le temps caractéristique, τ , est obtenu en divisant cette épaisseur par la vitesse de flamme

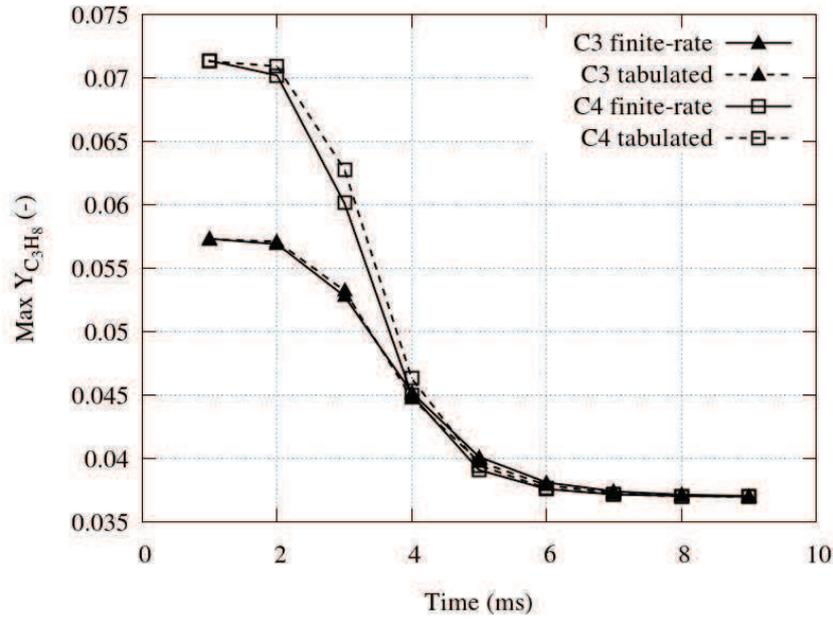


Fig 4.15 – Evolution temporelle de la fraction massique maximale de propane pour les cas *C3* et *C4* réalisés avec les deux modèles de chimie.

laminaire,

$$\tau = \frac{\delta_Z}{s_L}. \quad (4.10)$$

En effet, dans le référentiel de la flamme, le gradient de mélange se propage à la vitesse laminaire de flamme. Si une particule se déplaçait à travers le front de flamme, elle posséderait la vitesse laminaire s_L , et le temps caractéristique τ serait le temps qu'elle mettrait à traverser le gradient de stratification.

En prenant la vitesse laminaire de flamme du mélange le plus pauvre, soit $s_L = 13.07$ cm/s, le temps caractéristique $\tau = 3.3$ ms est obtenu. Ce temps concorde bien avec celui visible sur la figure 4.15. La décroissance a en effet lieu entre 2 et 5 ms. L'épaisseur de la stratification étant la même pour les deux cas et leurs vitesses de flamme laminaire étant relativement proches, il semble tout à fait cohérent que les évolutions soient similaires.

4.4.3 Evolution de la vitesse de flamme

Les différentes notions de vitesses de flamme ont été présentées les sections 3.8.1 et 3.8.2. La vitesse laminaire des flammes mono-dimensionnelles simulées dans cette section est :

$$s_{L,0} = \frac{\rho}{\rho_1}(s_a - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}), \quad (4.11)$$

où l'indice 1 fait ici référence aux gaz frais, $s_{L,0}$ à la vitesse de flamme laminaire non étirée, s_a à la vitesse absolue et \mathbf{u} à la vitesse du fluide. Le vecteur \mathbf{n} est le vecteur normal à la surface de flamme dirigé des gaz frais vers les gaz brûlés.

Les cas *C1* et *C2* sont d'abord calculés. Les courbes de vitesse se stabilisent rapidement pour atteindre les vitesses de flamme laminaire. Dans les deux cas, la vitesse obtenue avec la chimie tabulée est supérieure à celle obtenue avec la chimie complexe. Les vitesses obtenues pour ces deux cas sont données dans le tableau 4.6.

En chimie tabulée, le nombre de Schmidt de la variable de progrès est fixé et n'évolue pas au cours de la simulation. Afin d'avoir des simulations comparables, le nombre de Schmidt de

	$C1$	$C2$
Chimie complexe	12.92	36.84
Chimie tabulée	13.25	37.25
Cantera	13.07	37.53

Tableau 4.6 – Vitesse de flamme laminaire en cm/s obtenue pour les cas $C1$ et $C2$ avec les deux modèles de chimie.

la variable de progrès est gardé constant pour toutes les simulations. Il est ici fixé de manière à obtenir la vitesse laminaire de flamme donnée par Cantera pour la richesse $\varphi = 0.8$. Cette richesse a été choisie car elle se trouve au milieu des valeurs des richesses étudiées. Les caractéristiques de flamme entre $\varphi = 0.8$ et $\varphi = 0.95$ sont relativement proches ce qui explique la vitesse laminaire trouvée. Une légère sur-estimation de la vitesse laminaire est trouvée dans le cas $C1$.

Pour la chimie complexe, les vitesses laminaires des cas $C1$ et $C2$ sont inférieures aux vitesses de flamme obtenues avec Cantera et avec le modèle de chimie tabulée. Cette sous-estimation était attendue car elle était déjà présente dans la section 4.2.4, relatant l'utilisation du mécanisme semi-détaillé avec YALES2. L'erreur relative par rapport aux vitesses obtenues avec Cantera reste tout de même inférieure à 2%. Pour le cas $C1$, la vitesse laminaire de flamme obtenue en chimie complexe est d'ailleurs plus proche de la vitesse donnée par Cantera que la vitesse laminaire trouvée avec la chimie tabulée.

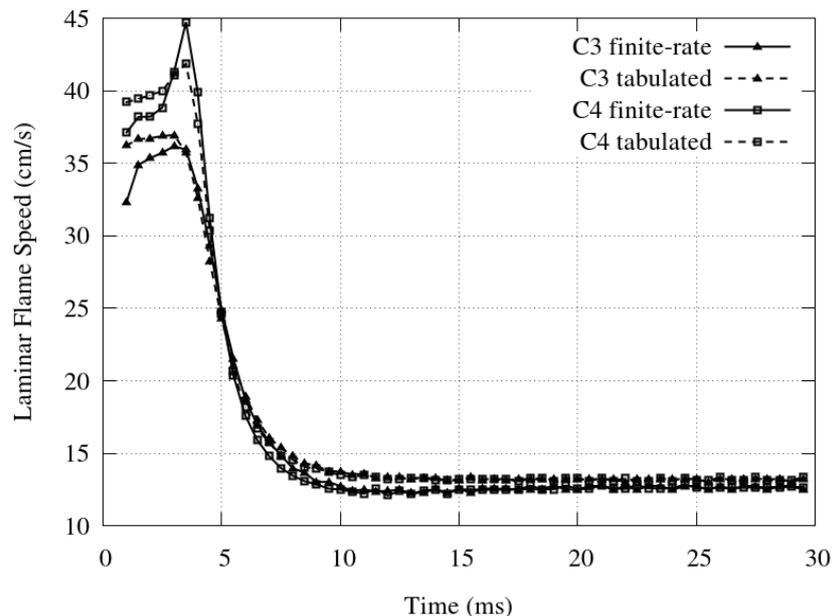


Fig 4.16 – Evolution temporelle de la vitesse laminaire de flamme pour les cas $C3$ et $C4$, réalisés avec les deux modèles de chimie.

Pour les cas $C3$ et $C4$, une évolution temporelle a lieu due à la stratification en richesse initiale. La vitesse de flamme laminaire pour ces deux cas de calcul est tracée sur la figure 4.16 avec les deux modèles de chimie.

La décroissance de la vitesse est indépendante du type de modèle utilisé. De même, peu de différences sont visibles entre les deux cas.

Dans la section précédente, il a été montré que la fraction massique de carburant correspondant au mélange pauvre était atteinte après 7 ms. Sur ce graphique, la vitesse laminaire corres-

pondant à un mélange $\varphi = 0.6$ n'est atteinte qu'après 10 ms. La flamme semble donc conserver certaines propriétés venues du mélange riche avant de se comporter comme une flamme pauvre se propageant dans un milieu homogène. Cette propriété avait déjà été mise en évidence pour des flammes méthane/air par Pires da Cruz *et al.* [44] et Ra [153]. Les auteurs l'ont reliée aux effets de moment chimique induit par une plus haute température de la flamme la plus riche dont la combustion est issue. Il faut noter cependant que le temps de décroissance caractéristique, $\tau = 3.3$ ms est tout de même retrouvé. En effet, l'évolution de la vitesse a lieu plus tardivement que celle des espèces, entre $t = 3.5$ ms et $t = 7$ ms.

On remarque pour le cas $C4$ que la vitesse laminaire augmente pour ensuite prendre une pente descendante. Le mélange passe d'abord par des richesses légèrement riches puis par la richesse stœchiométrique pour atteindre une richesse pauvre. Les vitesses laminaires des flammes de transition étant plus importantes que la vitesse initiale, il est logique de voir ce pic apparaître.

Quelques différences sont tout de même notables en fonction du modèle de chimie utilisé. Tout d'abord sur la transition de vitesse du cas $C4$. Les valeurs atteintes sont plus grandes, ce qui peut être expliqué par la diffusion différentielle. Le même effet est visible autour de $t = 10$ ms, on remarque en effet à cet endroit que l'écart entre les courbes chimie complexe et chimie tabulée est plus important que par la suite. La vitesse laminaire descend plus bas que la vitesse laminaire équivalente à la richesse $\varphi = 0.6$, pour ensuite remonter tout doucement.

4.5 Propagation bi dimensionnelle

L'analyse des cas mono-dimensionnels étant terminée, les cas bi-dimensionnels sont maintenant étudiés. Les calculs sont réalisés sur le calculateur IBM iDataPlex du CRIHAN et sur le calculateur IBM Blue Gene/Q de l'IDRIS pour les cas en chimie complexe et en chimie tabulée, respectivement.

Tout d'abord, la forme du noyau de flamme est analysée. Ensuite, les vitesses de flamme sont observées. Contrairement aux flammes $1D$, la notion d'étirement peut exister en $2D$. La réponse de la flamme à l'étirement doit être examinée.

4.5.1 Présentation de la configuration

4.5.1.1 Domaine et maillage

Concernant les cas bi-dimensionnels, la propagation d'une flamme propane/air est observée dans un domaine circulaire de 40 cm de rayon. Ce rayon est relativement grand comparé à la taille que la flamme occupera afin d'éviter les interactions avec les conditions limites. En effet, les conditions de sortie peuvent influencer sur la forme et le comportement de la flamme si le domaine n'est pas assez important [4].

Le domaine est discrétisé à l'aide de triangles et contient 4.4 millions d'éléments. Le domaine est découpé en disques concentriques superposés. Le plus petit disque possède un rayon de 5 cm. A l'intérieur, ses mailles possèdent une discrétisation spatiale de $40 \mu\text{m}$. Un déraffinement est ensuite opéré pour les couches suivantes. Le maillage est construit de telle manière que le rayon maximal de la flamme observée soit toujours inclus dans le disque maillé le plus finement.

La densité de ce maillage final est donnée sur la figure 4.17. Le maillage est ici colorié par l'inverse de la taille de maille en mm^2 .

Afin d'avoir une meilleure comparaison chimie complexe/chimie tabulée, le même maillage est utilisé pour toutes les études bi-dimensionnelles présentées dans cette section.

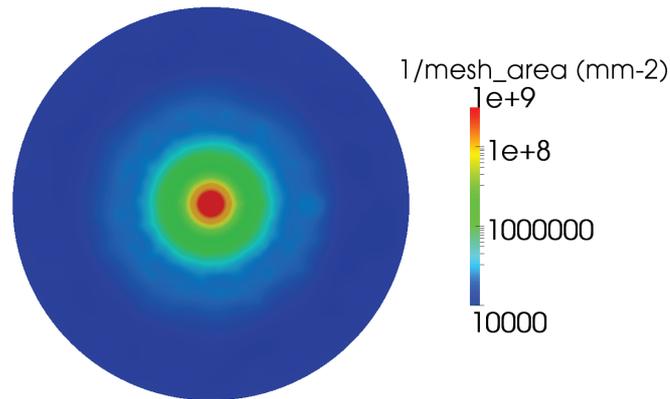


Fig 4.17 – Densité de maillage du cas 2D. L’endroit où la flamme se propage est maillé plus finement.

4.5.1.2 Conditions initiales et conditions limites

Pour les cas *C3* et *C4*, une bande de gaz riche d’épaisseur totale 4 mm est située de manière symétrique autour de l’axe *X*. Le lecteur remarquera ici que le cas 1D correspond à la propagation de la flamme rencontrant la stratification présente sur l’axe *Y* positif dans les cas bi-dimensionnels. La transition entre le mélange le plus riche et le mélange le plus pauvre est effectuée comme dans les cas 1D, soit à l’aide d’un profil de tangente hyperbolique d’épaisseur 0.5 mm.

Pour analyser le comportement intrinsèque de la flamme, il est nécessaire que celle-ci se propage librement. Le noyau de flamme est allumé au centre du domaine. Son expansion est symétrique par rapport à l’axe *X*. Une condition de sortie est imposée sur le cercle extérieur du domaine.

Le champ de richesse initiale ainsi que le noyau de gaz brûlés sont représentés sur la figure 4.18 pour le cas *C3*.

Comme analysé dans la section 4.2.4, l’utilisation de la chimie complexe requiert d’impliciter la diffusion afin de conserver un temps CPU raisonnable. Un champ de vitesse doit donc être mis en place afin d’éviter un pas de temps convectif infini.

Le noyau est allumé dans un mélange homogène. Les gaz brûlés sont considérés au repos dans celui-ci, sous l’hypothèse de flamme sans épaisseur. La vitesse dans les gaz frais s’obtient à partir de l’équation de continuité. Si $r(t)$ désigne le rayon de la flamme en expansion cylindrique, la vitesse du fluide pour tout $R > r(t)$, est donnée par :

$$u(R) = \left(\frac{r(t)}{R} \right) \left(1 - \frac{\rho_2}{\rho_1} \right) \frac{dr(t)}{dt}, \quad (4.12)$$

où les indices 1 et 2 correspondent respectivement aux gaz frais et aux gaz brûlés. La fonction $\frac{dr(t)}{dt}$ n’est pas initialement connue. Elle est approchée à partir de flammes 2D homogènes réalisées en chimie tabulée. Après plusieurs milli-secondes, la valeur de $\frac{dr(t)}{dt}$ tend vers une constante. Les valeurs retenues pour les différents cas sont répertoriées table 4.7.

Le temps initial des simulations est calculé de la même manière que pour les simulations 1D précédentes.

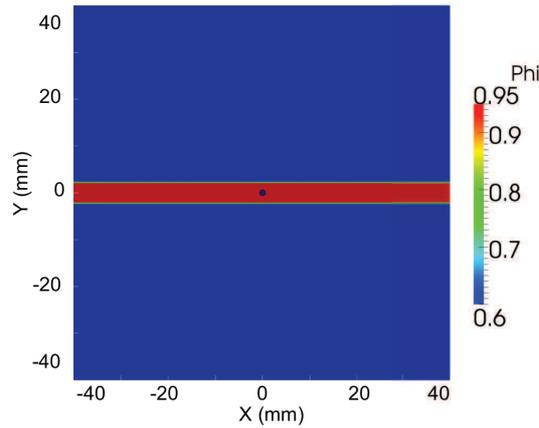


Fig 4.18 – Cas *C3* : champ de richesse à $t = 0$ ms. Le disque bleu foncé dans la bande rouge représente le noyau de gaz brûlés initial.

	<i>C1</i>	<i>C2</i> et <i>C3</i>	<i>C4</i>
dr/dt (m/s)	0.6	2.5	2.0

Tableau 4.7 – Récapitulatif des vitesses servant à l'initialisation des cas *2D*.

4.5.2 Particularité du cas *C1*

La réalisation du cas *C1* a été effectuée avec les deux modèles de chimie. Cependant, pour le cas effectué en chimie complexe, le noyau de flamme ne parvient pas à se propager. Le noyau commence en effet à se développer mais finit par s'éteindre après quelques milli-secondes. Il semblerait que l'étirement soit trop important pour une telle richesse dans un cas *2D*. En effet, la richesse étudiée est proche des limites d'inflammabilité.

Cette difficulté d'allumage liée à l'étirement ainsi qu'à la faible richesse de la flamme se retrouve aussi dans les expériences. En effet, les données sur des flammes de cette richesse sont toujours extrapolées [88, 117]. Il n'existe actuellement pas de données robustes pour la richesse $\varphi = 0.6$ dans des cas homogènes, principalement à cause de la forte sensibilité à l'étirement pour les flammes de propane qui conduit à l'extinction. Le cas *C1* réalisé en chimie complexe reproduit bien les phénomènes physiques.

Cependant cette même configuration ne présente aucune difficulté à être simulée en chimie tabulée. La chimie tabulée avec FPI est connue pour ne pas reproduire les effets des forts taux d'étirement [176]. L'évolution temporelle de cette dernière est représentée sur la figure 4.19 grâce à un contour de flamme tracé à chaque milli-seconde, de 1 à 10 ms.

Les contours présents sur la figure 4.19 sont comme attendu des cercles concentriques. On remarque tout de même que la distance entre chaque cercle est dépendante des temps observés. Elle est en effet plus petite pendant les premières milli-secondes puis s'allonge pour atteindre une distance régulière. Ce comportement est en adéquation avec de précédentes études sur les flammes homogènes en expansion [104, 5].

Pour des richesses plus élevées, comme celle du cas *C2*, les simulations en chimie complexe et en chimie tabulée donnent le même résultat.

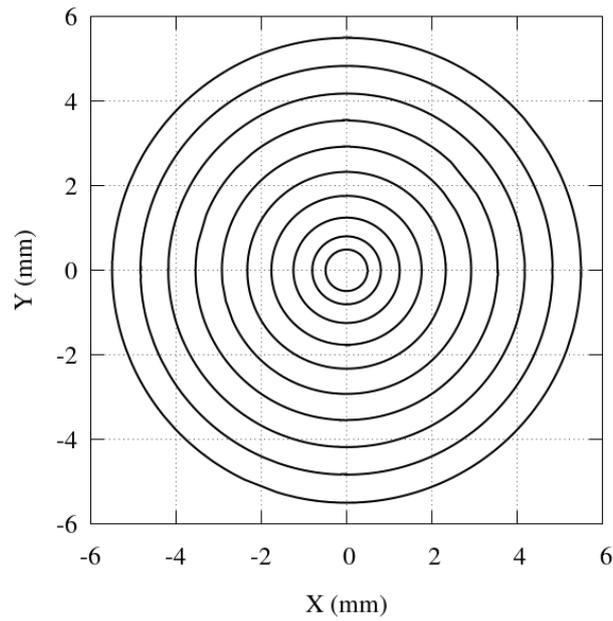


Fig 4.19 – Evolution temporelle du contour de flamme pour le cas *C1* en chimie tabulée. Le contour de flamme est tracé à chaque milli-seconde, de 1 à 10 ms.

4.5.3 Evolution de la forme du noyau de flamme

La déformation du noyau de flamme d'une flamme stratifiée par rapport à une flamme homogène est ici observée. La stratification du mélange entraîne une déviation de la forme circulaire du noyau. La figure 4.20 montre le champ de fraction massique du propane pour le cas *C3* en chimie complexe aux trois premières milli-secondes simulées.

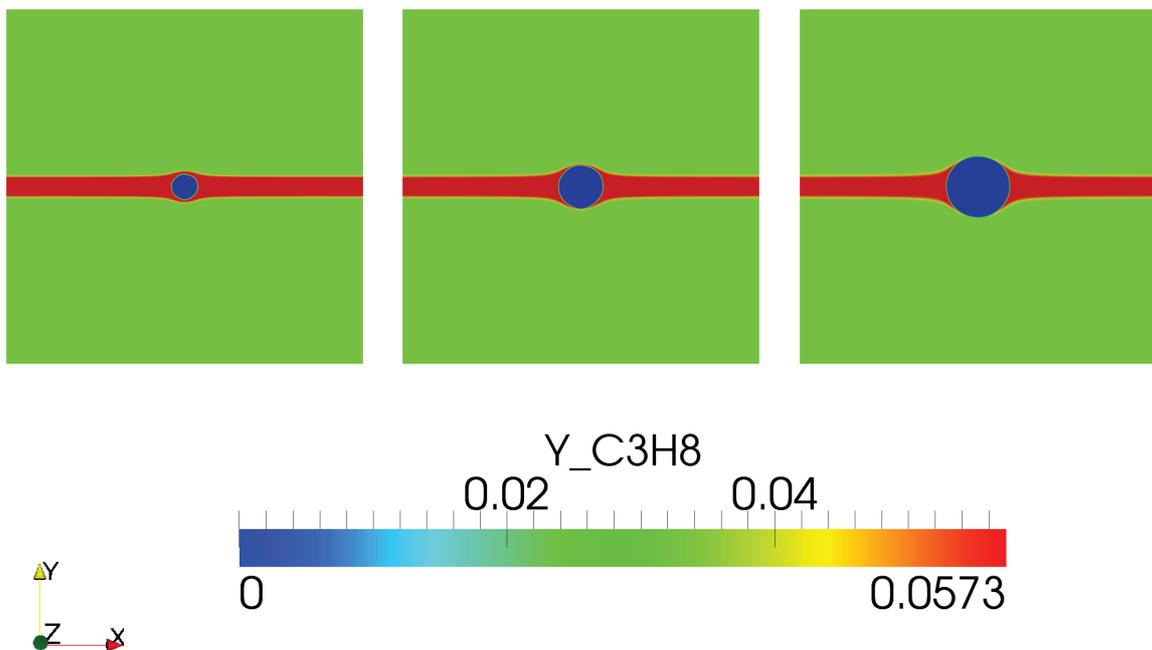


Fig 4.20 – Champs de fraction massique du propane aux trois premières milli-secondes. Cas *C3*, réalisé en chimie complexe. Carré de 8 cm de côté.

Le noyau commence, à $t = 1$ ms, par pousser la bande de gaz riche. La largeur de celle-ci au niveau du noyau devient plus importante. A $t = 2$ ms, le noyau devrait déjà être dans le mélange plus pauvre, on remarque cependant sur la figure 4.20 qu'il est toujours entouré de mélange riche. Ce n'est qu'à partir de $t = 3$ ms que la bande de gaz riche est percée. La transition de richesse entre le mélange riche et le mélange pauvre ne se fait donc pas de manière aussi brutale que ce que l'on pouvait supposer à priori.

Les différentes variables vont être observées afin de mieux comprendre cette transition. Tout d'abord, l'évolution du contour de flamme du cas *C3* en chimie tabulée est représentée sur la figure 4.21.

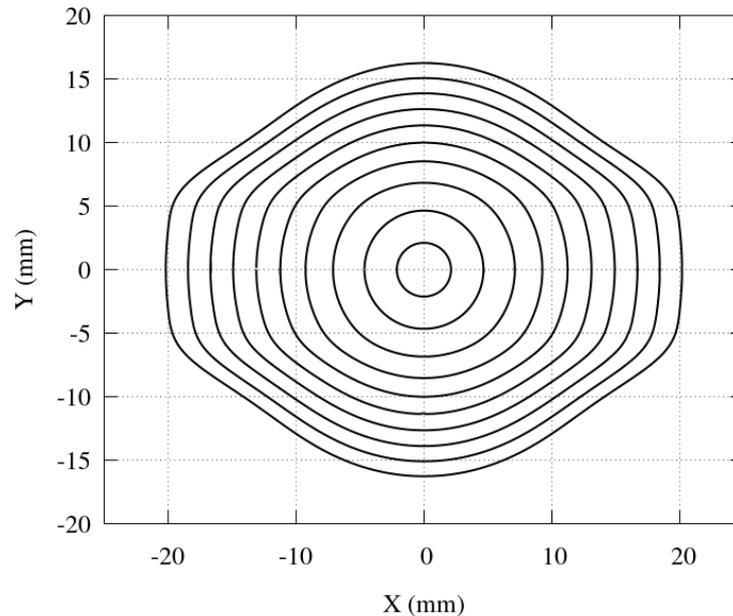


Fig 4.21 – Evolution temporelle du contour de flamme pour le cas *C3* en chimie tabulée. Le contour de flamme est tracé à chaque milli-seconde, de 1 à 10 ms.

Jusqu'à 2.5 ms, le noyau possède une forme cylindrique. Cette forme peut être expliquée par la présence du mélange riche autour du noyau. Ensuite, cette forme s'allonge dans la direction axiale, où le mélange le plus riche est présent. Les écarts entre les contours de flammes sur l'axe X puis sur l'axe Y semblent indiquer que la flamme est plus rapide dans la direction axiale. Ce comportement est cohérent puisqu'il s'agit de l'endroit où le mélange est le plus riche et possède la vitesse laminaire la plus rapide. Néanmoins, l'asymétrie de la flamme est moins accentuée que prévue. La forme attendue était une flamme possédant la longueur et la largeur équivalent respectivement au rayon du cas *C2* et du cas *C1* au même instant, soit une flamme plus allongée possédant une hauteur moindre. Les contours de la flamme *C4* ne sont pas représentés ici car leur forme est très similaire.

L'asymétrie de cette flamme est étudiée plus en détails. Soit L_x et L_y les distances entre les deux points situés respectivement sur l'axe X et sur l'axe Y . L'axe X correspond à l'endroit où le mélange le plus riche évolue. Au contraire, l'axe Y est la direction où la stratification la plus brutale est rencontrée et l'endroit où le mélange pauvre est le plus rapidement atteint. Le ratio L_x/L_y est appelé coefficient d'asymétrie. Les valeurs de ce coefficient pour les cas *C3* et *C4* résolus avec les deux modèles de chimie sont données sur la figure 4.22.

Les calculs en chimie complexe sont en adéquation avec les résultats attendus, à savoir, une élongation plus importante pour le cas *C4*, au moins durant les premières milli-secondes. La vitesse laminaire d'un mélange propane air de richesse $\varphi = 1.2$ est en effet supérieure à celle

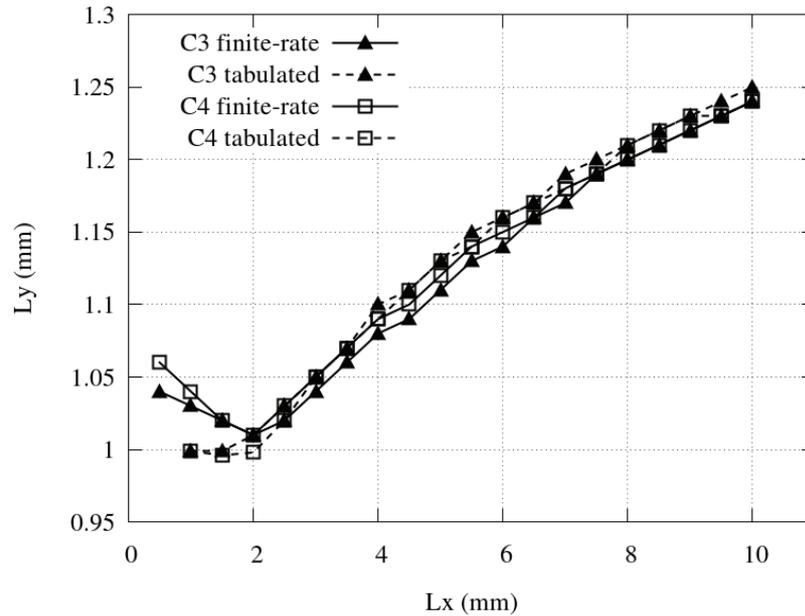


Fig 4.22 – Coefficient d’asymétrie pour les cas $C3$ et $C4$. Haut : chimie complexe. Bas : chimie tabulée.

d’un mélange de richesse $\varphi = 0.95$. Les courbes restent tout de même très similaires pour les deux cas et pour les deux modèles de chimie utilisés.

Dans tous les cas, le ratio L_x/L_y n’excède pas la valeur 2. En se référant aux cas homogènes, la vitesse absolue du cas $C1$ atteint un plateau à $s_a = 0.64$ m/s et celle du cas $C2$ à $s_a = 2.55$ m/s. L’élongation de la flamme aurait due être quatre fois plus importante sur l’axe X que sur l’axe Y . Une explication de ce phénomène sera donnée section 4.5.7.

La longueur de la flamme en fonction de sa largeur est présentée sur la figure 4.23. Sur ce graphique, le début de la propagation n’est pas montré afin de mieux observer la déformation finale.

Deux choses sont visibles sur ce graphique. Premièrement, la taille des flammes simulées en chimie tabulée est plus importante. En effet, les durées simulées sont les mêmes, soit ici 10 ms. Les valeurs de L_x et de L_y à cet instant sont récapitulées dans le tableau 4.8.

	$C3$		$C4$	
	L_x	L_y	L_x	L_y
Chimie complexe	3.74	3.02	4.35	3.50
Chimie tabulée	4.12	3.30	4.47	3.59

Tableau 4.8 – L_x et L_y en cm à $t = 10$ ms pour les cas $C3$ et $C4$ avec les deux modèles de chimie.

Tout comme en une dimension, la vitesse de flamme semble plus élevée avec la chimie tabulée. Cette hypothèse sera vérifiée dans la section 4.5.5.

Le second point surprenant est l’écart visible entre les courbes chimie complexe et chimie tabulée pour le cas $C3$. Cet écart était attendu pour le cas $C4$ où il n’apparaît pas. En effet, lors de la simulation en chimie complexe, le coefficient de diffusion de chaque espèce est pris en compte contrairement à la chimie tabulée. Les précédentes études réalisées sur les flammes stratifiées relatent un effet mémoire dû à la diffusion d’espèces telle que H_2 . Il paraîtrait cohérent

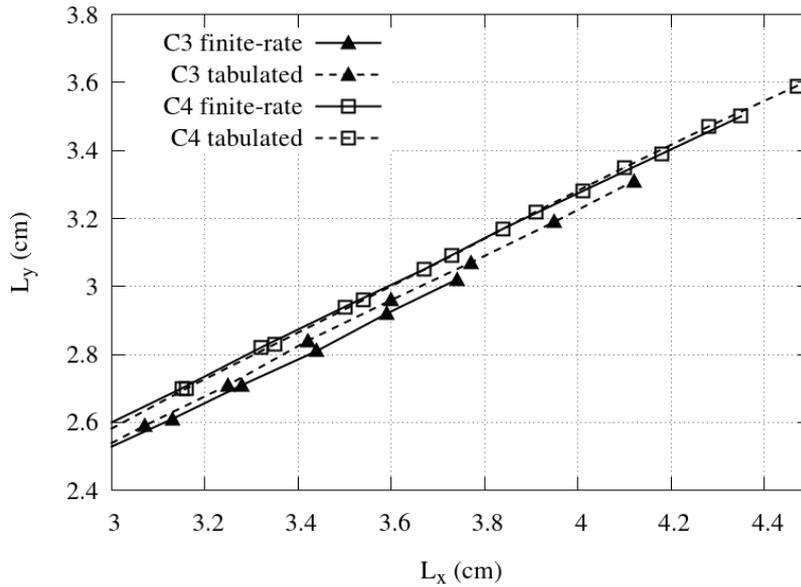


Fig 4.23 – L_y en fonction de L_x lorsque la flamme a commencé à se développer pour les cas $C3$ et $C4$ avec les deux modèles de chimie.

que cette diffusion soit plus présente pour des flammes riches. Cependant, cet écart est vraiment minime, ce qui indique que sur des temps longs, les effets de la diffusion différentielle sur la dynamique de la flamme sont négligeables.

4.5.4 Diffusion des espèces

Même si les effets de diffusion différentielle sont négligeables sur la dynamique de flamme, ils peuvent être importants sur la distribution des espèces mineures. Pour les cas en chimie complexe, la diffusion différentielle est correctement prise en compte. Cependant, pour les cas en chimie tabulée, seuls deux coefficients de diffusion sont présents, un pour la fraction de mélange et un pour la variable de progrès.

L'hydrogène possède un nombre de Schmidt $Sc_{H_2} = 0.29$. Il diffuse plus vite que de nombreuses espèces telles que CO_2 ou C_3H_8 . En outre, l'hydrogène est connu pour être affecté par la stratification [177, 178]. Son évolution dans le cas $C4$ est présentée sur la figure 4.24 pour les deux modèles de chimie.

La figure 4.24 indique que la présence de H_2 est plus importante aux endroits où la flamme est riche. La diffusion de H_2 dépend du modèle de chimie. Pour les deux cas, les lieux où H_2 est formé sont similaires. Cependant, les formes des profils diffèrent en fonction du modèle de chimie utilisé pour la résolution de la simulation.

Dans le cas de la chimie complexe, la diffusion de l'hydrogène est plus importante que celle de la variable de progrès Y_C . Un cône s'établit du front vers le centre de la flamme le long de la direction axiale. Un ovale de composition homogène se distingue dans la direction radiale. Toutes les espèces sont considérées. L'hydrogène diffusant rapidement, il a tendance à se diriger vers les gaz pauvres et sera brûlé par l'oxygène encore présent dans ces gaz.

Pour la chimie tabulée, H_2 évolue sous forme de bandes. L'axe X correspond à la bande où l'hydrogène est le plus présent. Une stratification dans la direction radiale peut être observée. Là aussi, un ovale se distingue dans la direction radiale. Dans la chimie tabulée, un couple de valeurs fraction de mélange et variable de progrès renvoie à une composition unique. Une stratification

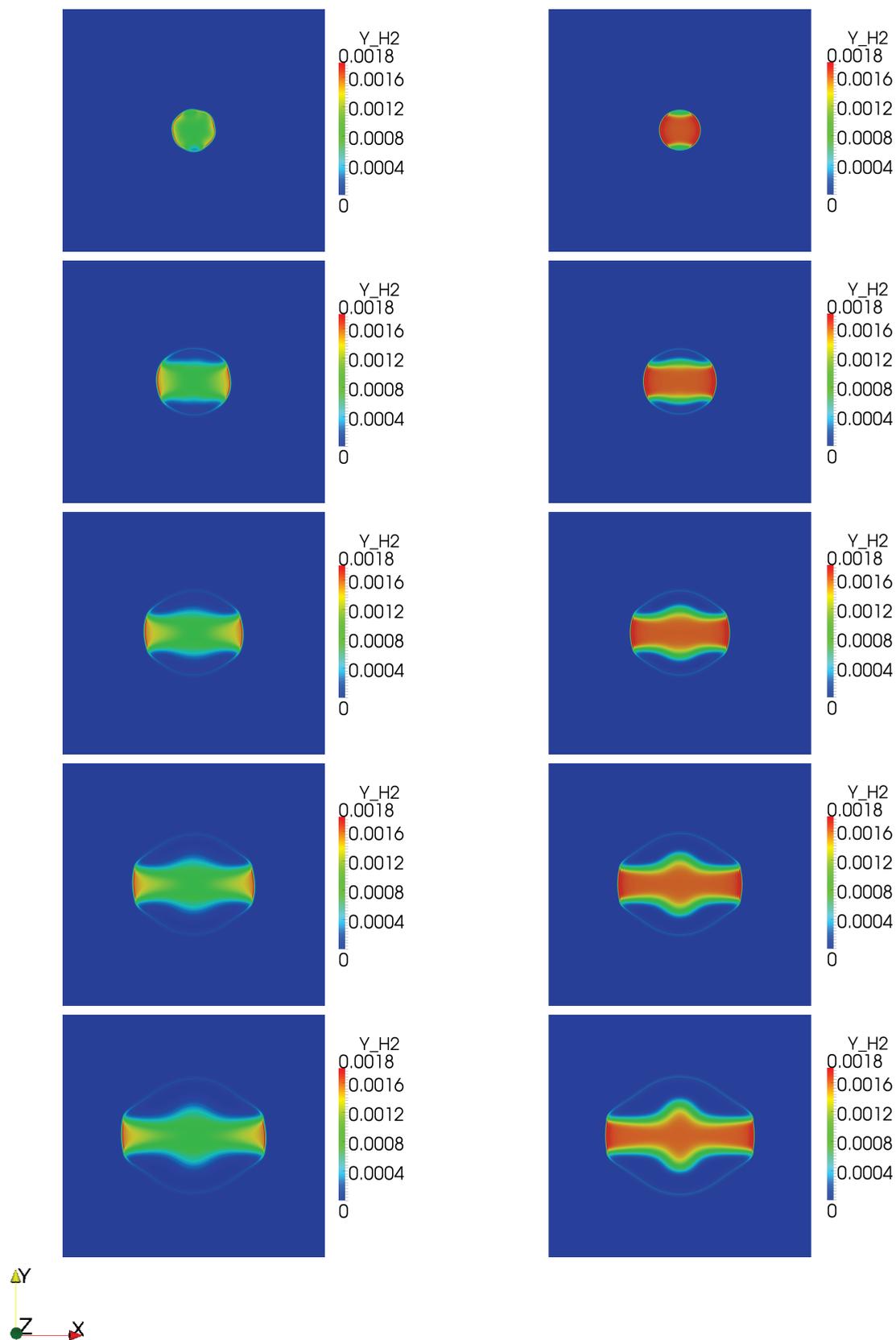


Fig 4.24 – Evolution temporelle de la fraction massique de H_2 de 2 à 10 ms, par pas de 2 ms pour le cas $C4$. Carré de 8 cm de côté. Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.

de richesse est observée au sein de la flamme. Celle-ci explique les bandes présentes. L'ovale peut venir de la diffusion de C et Z au sein de la flamme.

Afin de mieux comprendre la distribution de H_2 dans le cas $C4$, le terme source de cette espèce est observé, figure 4.25. Des fronts de flammes non-prémélangés apparaissent le long de la ligne stœchiométrique dans les gaz brûlés. Si l'on combine ces fronts aux fronts prémélangés riche et pauvre présents sur le contour de la flamme, quatre flammes triples apparaissent, illustrées par les lignes blanches sur la figure 4.25.

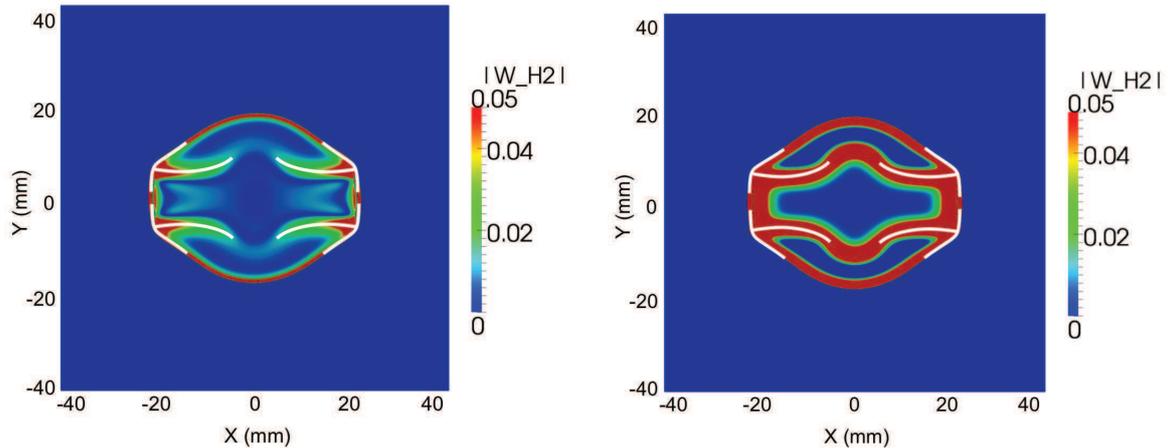


Fig 4.25 – Champ du terme source de H_2 saturé pour le cas $C4$ à $t = 10$ ms, avec un schéma de la localisation des flammes triples (lignes blanches). Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.

La fraction massique d'hydrogène résultante de ces flammes dépend fortement du modèle de chimie puisque la diffusion joue un rôle important dans la structure d'une flamme non-prémélangée.

Dans la chimie tabulée, la diffusion est conduite par la diffusion de la fraction de mélange, Z , qui possède un Schmidt égal à $Sc_Z = 1.36$, tandis que dans la chimie complexe, toutes les espèces possèdent une vitesse de diffusion réaliste. Dans tous les cas, l'excès d'hydrogène présent dans les gaz brûlés n'atteint pas le front de flamme et par conséquent ne participe pas à la propagation du front de flamme dans le mélange le plus pauvre. Le dégagement de chaleur des flammes de diffusion est très petit et n'affecte pas l'expansion du noyau. Par conséquent, l'évolution de la forme de la flamme est la même en chimie complexe et en chimie tabulée.

Une autre façon d'observer la diffusion des espèces est d'examiner le gradient de la fraction de mélange, Z . Le champ de cette variable est montré au temps $t = 6$ ms pour le cas $C4$ avec les deux modèles de chimie, figure 4.26.

La fraction de mélange Z du cas réalisé en chimie complexe est basée sur la conservation des atomes, équation (3.123). Le problème de cette définition est que cette grandeur n'est pas conservée à travers la flamme. La définition de la fraction de mélange dans le cas de la chimie tabulée ne présente pas cet inconvénient. La différence de définition explique la présence d'un important gradient au niveau du contour de flamme pour le cas réalisé avec la chimie complexe. Ces figures illustrent bien la difficulté à mesurer la fraction de mélange dans une flamme ne possédant pas un Lewis unitaire [46, 133].

Une bande de gradient de fraction de mélange apparaît au sein des gaz brûlés, dont la cause semble être la diffusion des gaz riches vers les gaz pauvres. On remarque que même si la diffusion de chaque espèce n'est pas prise en compte de la même manière en chimie tabulée et en chimie complexe, la diffusion de Z est quant à elle, bien prise en compte par la chimie tabulée.

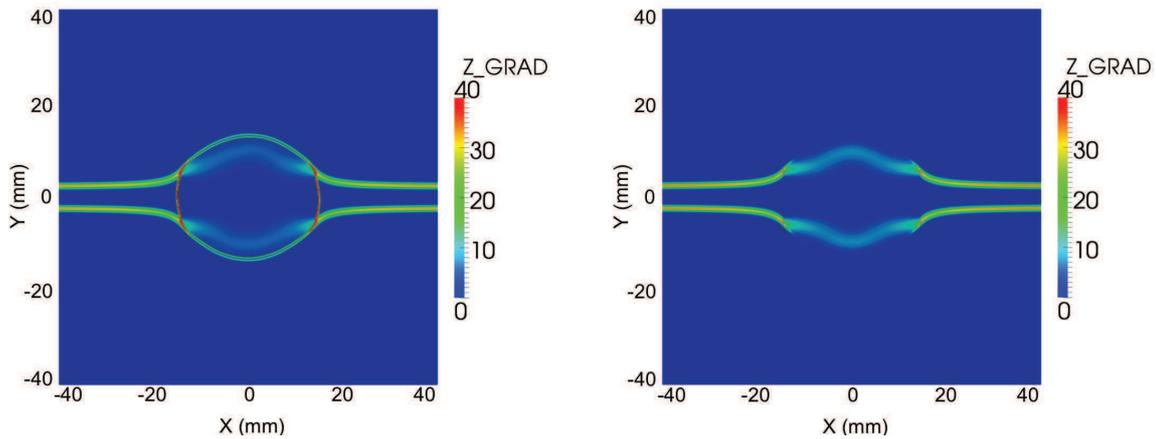


Fig 4.26 – Champ du gradient de la fraction de mélange pour le cas $C4$ à $t = 6$ ms. Carré de 8 cm de côté. Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.

L'évolution temporelle de la fraction massique de propane pour les flammes mono-dimensionnelles a été présentée dans la sous-section 4.4.2. Cette évolution est ici comparée pour le cas $C3$ en chimie complexe, à celle obtenue le long de l'axe Y , présentant la même stratification initiale en richesse, figure 4.27.

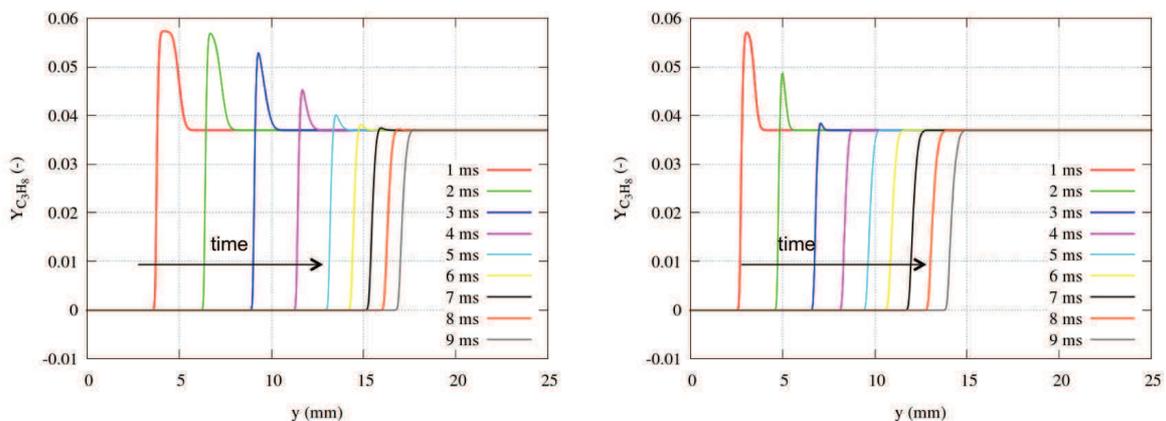


Fig 4.27 – Evolution temporelle de la fraction massique du propane en chimie complexe pour le cas $C3$. Gauche : 1D. Droite : 2D.

Ces images montrent que la fraction massique de C_3H_8 ressent beaucoup plus rapidement la stratification en deux qu'en une dimension. La fraction massique correspondant à $\varphi = 0.6$ est en effet atteinte après 3 ms en deux dimensions et seulement après 7 ms en une dimension. Cette constatation s'avère vérifiée pour toutes les autres fractions massiques présentées dans la sous-section 4.4.2.

La différence notable entre les simulations en une et deux dimensions semble provenir de l'étirement. En effet, les flammes mono-dimensionnelles sont planes tandis que les flammes en deux dimensions sont en expansion et soumises à un fort taux d'étirement, en particulier durant les premières milli-secondes lorsque le rayon est petit.

4.5.5 Vitesse de flamme

Dans cette section, les vitesses de flamme sont analysées. Il est en effet supposé que les flammes stratifiées sont affectées par les gaz brûlés provenant des premiers instants où la flamme se propage dans un milieu plus riche. Ce phénomène, caractéristique des flammes stratifiées, a été nommé effet mémoire de la flamme. Par conséquent, notre attention se porte plus particulièrement sur deux points particulier du front de flamme. Ces points sont représentés sur la figure 4.28.

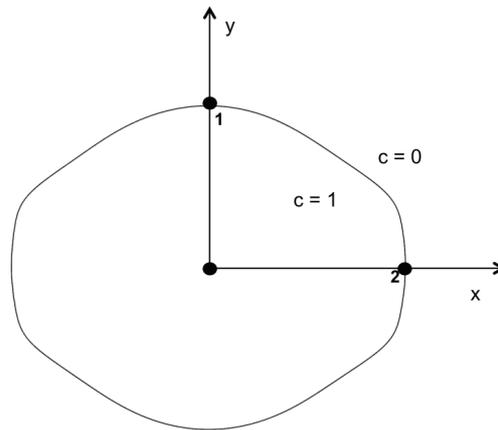


Fig 4.28 – Localisation des points où les vitesses de flamme sont étudiées.

Ces points sont les points de la flamme situés du côté positif de chaque axe. Le point 1 correspond à l'endroit le plus affecté par le gradient de richesse. Le point 2, quant à lui, est le point où le mélange le plus riche est toujours présent.

Les définitions des vitesses des flammes cylindriques et sphériques ont été énoncées dans la section 3.8.2. La vitesse absolue est d'abord analysée. Pour rappel, l'expression de celle-ci est :

$$s_a = \frac{dr}{dt} . \quad (4.13)$$

Typiquement, pour des flammes homogènes, cette vitesse augmente durant les premières milli-secondes jusqu'à atteindre un plateau. Une comparaison de l'évolution temporelle au point 2 pour les cas *C2* et *C3*, réalisés en chimie tabulée, montre que ce comportement est bien retrouvé pour la flamme homogène, figure 4.29. Le comportement de la flamme stratifiée ne répond plus du tout à cette description.

Afin de mieux comprendre ce comportement, une évolution temporelle de la vitesse absolue aux points 1 et 2 est donnée sur la figure 4.30 pour les cas *C3* et *C4* réalisés avec les deux modèles de chimie.

Le comportement global de la vitesse absolue est le même, quel que soit le point analysé, le degré de stratification, et le modèle de chimie utilisé. La vitesse absolue commence par augmenter durant les premières milli-secondes puis prend une pente négative jusqu'à atteindre un plateau. Les valeurs atteintes sont dépendantes de la stratification initiale. Pour les deux cas, les vitesses obtenues avec la chimie complexe sont inférieures à celles obtenues en chimie tabulée.

Le comportement de la courbe au voisinage du point 1 s'explique facilement. La flamme évolue tout d'abord dans un mélange homogène, d'où la tendance de la vitesse absolue à augmenter. Elle passe ensuite par une phase de transition de richesse, jusqu'à atteindre la richesse $\varphi = 0.6$. La transition entre le mélange riche et le mélange pauvre est lissée par la diffusion

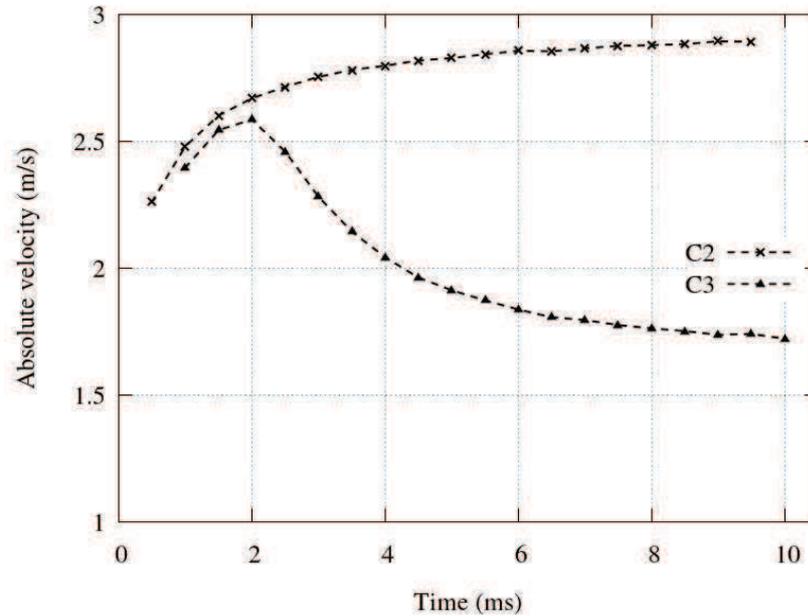


Fig 4.29 – Comparaison de l'évolution temporelle de la vitesse absolue au point 2 pour les cas $C2$ et $C3$, chimie tabulée.

moléculaire. Les richesses rencontrées étant moins élevées, la vitesse absolue a tendance à diminuer. Les plateaux atteints restent tout de même supérieurs à celui obtenu pour le cas $C1$ en chimie tabulée, pour lequel on trouve $s_a = 0.64$ m/s.

Pour un même type de chimie, la courbe du cas $C4$ est toujours située au dessus de celle correspondant au cas $C3$. Durant la phase de transition, les richesses rencontrées possèdent en effet les vitesses laminaires les plus rapides. Le plateau final du cas $C4$ est plus élevé. Les caractéristiques de la flamme à un instant donné semblent dépendantes de son passé ainsi que des autres richesses rencontrées par la flamme au même instant.

La compréhension du comportement de la courbe au voisinage du point 2 s'avère être plus délicate. La flamme à cet endroit possède toujours la même richesse, $\varphi = 0.95$ pour le cas $C3$ et $\varphi = 1.2$ pour le cas $C4$. Un comportement du type homogène était donc escompté. L'étude de la vitesse absolue ne permet pas d'apporter une interprétation à cette courbe. D'autres variables doivent donc être analysées.

Pour simplifier l'étude, les flammes situées aux points 1 et 2 sont supposées être des flammes planes. Cette hypothèse permet d'exprimer la vitesse laminaire,

$$s_L = (s_a - u_{fg}), \quad (4.14)$$

où s_L à la vitesse laminaire, et s_a à la vitesse absolue.

La vitesse locale des gaz frais, u_{fg} , est souvent choisie comme la vitesse maximale après la flamme [12]. La structure d'une flamme prémélangée peut être séparée en deux zones, la zone de préchauffage et la zone de réaction. La forte différence de température entre la zone de préchauffage et la zone de réaction entraîne une modification de la vitesse du fluide près du front de flamme. Le profil de vitesse des gaz frais atteint son maximum juste avant la zone de préchauffage. Groot et De Goey [72] montrent dans leur étude que cette variation est due à la variation de densité à travers le front de flamme.

Les profils de la variable de progrès, de la densité et de la vitesse le long du côté positif de l'axe Y sont représenté sur la figure 4.31.

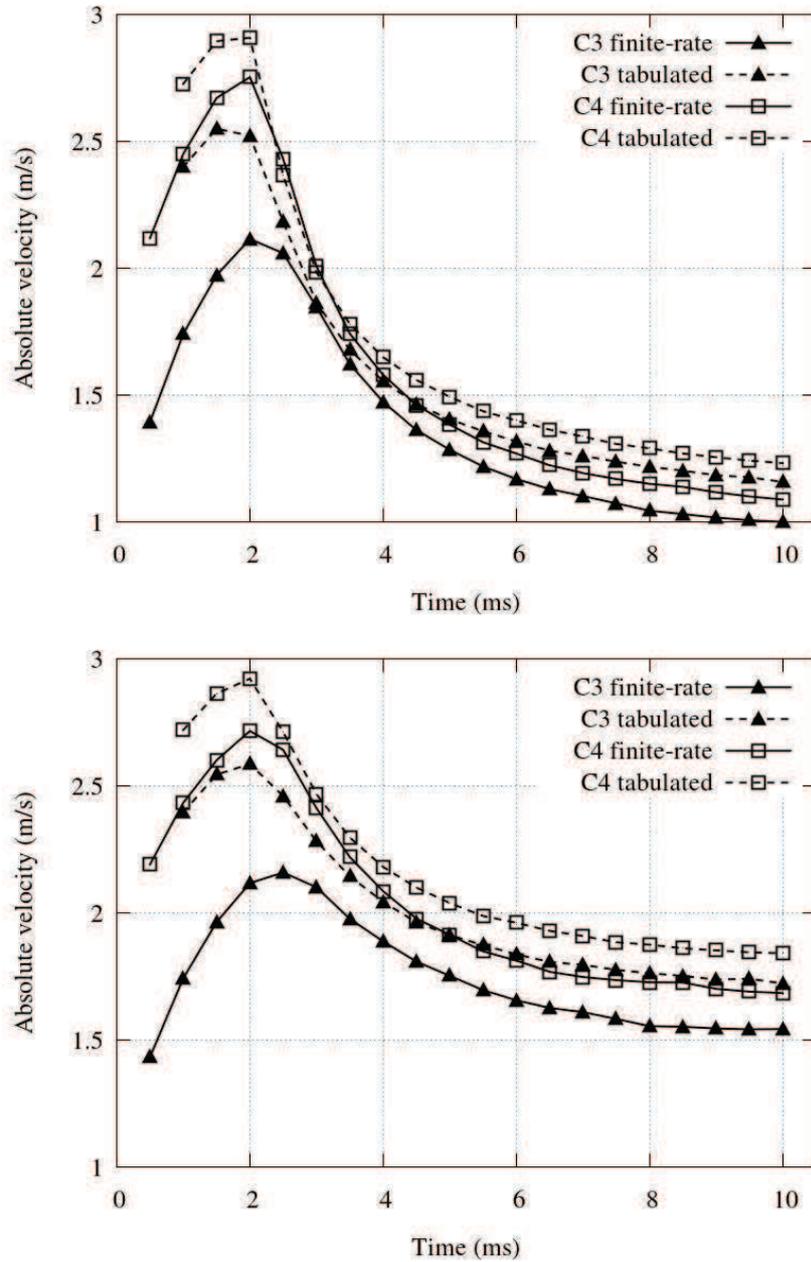


Fig 4.30 – Evolution de la vitesse absolue aux points étudiés pour les cas $C3$ et $C4$ résolus avec les deux modèles de chimie. Haut : point 1. Bas : point 2.

On remarque sur cette figure que le point où la vitesse est maximale, u_{fg} ne correspond pas à la densité des gaz non brûlés. Le rapport de densité doit être pris en compte dans la formulation de la vitesse laminaire,

$$s_L = \frac{\rho_{fg}}{\rho_u} (s_a - u_{fg}), \quad (4.15)$$

où l'indice u correspond aux gaz non brûlés, assez loin du front de flamme.

Cette nouvelle formulation rend subsidiaire le choix de prendre la vitesse u_{fg} comme référence. En effet, cette formulation est valable pour n'importe quelle vitesse située dans la zone de réaction pourvue que cette dernière soit liée à la densité correspondante. Les premiers résultats obtenus avec la vitesse u_{fg} n'étant pas satisfaisants, une autre vitesse a été mesurée. La vitesse et la densité correspondant à $C = 0.73$ ont été prises comme référence. Cette valeur est en effet celle

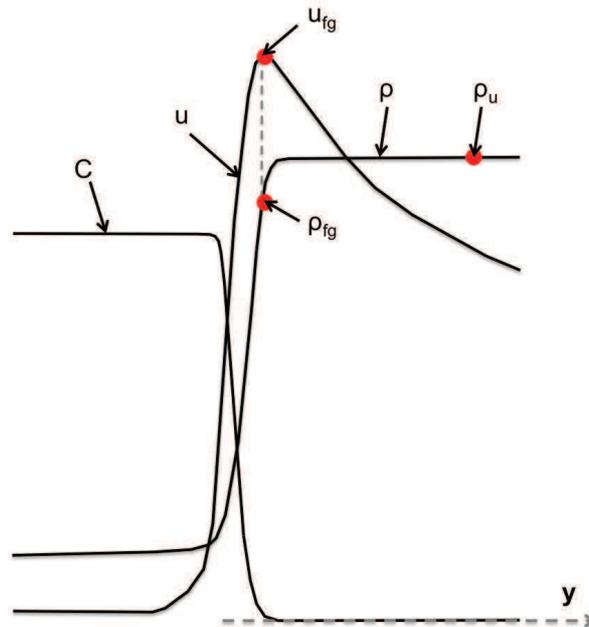


Fig 4.31 – Schéma des profils de la variable de progrès, de la vitesse du fluide et de la densité le long de l'axe Y positif.

pour laquelle le terme source de la variable de progrès est maximal.

Afin de valider cette procédure pour déterminer s_L , nous l'appliquons au cas $C2$, réalisé avec les deux modèles de chimie, figure 4.32.

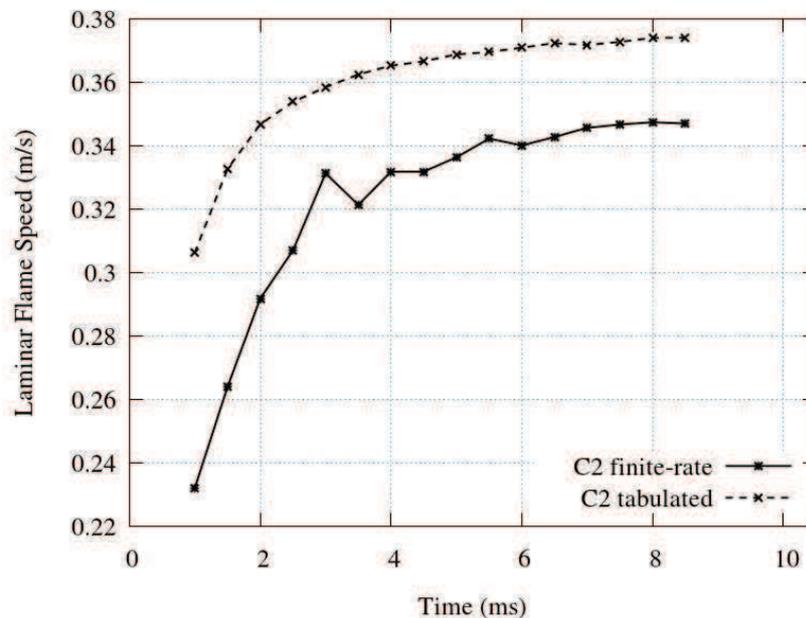


Fig 4.32 – Evolution temporelle de la vitesse laminaire de flamme pour le cas $C2$, réalisé avec les deux modèles de chimie.

Les deux courbes ont la même tendance bien qu'une nette différence de l'ordre de 8% soit visible entre la chimie complexe et la chimie tabulée. La vitesse laminaire obtenue avec Cantera est $s_L = 37.53 \text{ cm/s}$. Sur cette figure, les vitesses laminaires obtenues sont les vitesses de flammes étirées, ce qui explique les faibles valeurs durant les premières milli-secondes. L'in-

fluence de l'étirement sera analysé dans la prochaine section. Les vitesses obtenues après 8 ms sont relativement proches de la vitesse donnée par Cantera bien que la chimie complexe semble sous-estimer cette dernière. La méthode est validée et appliquée aux cas *C3* et *C4*.

L'évolution de la vitesse laminaire au point 1 est tout d'abord observée, figure 4.33.

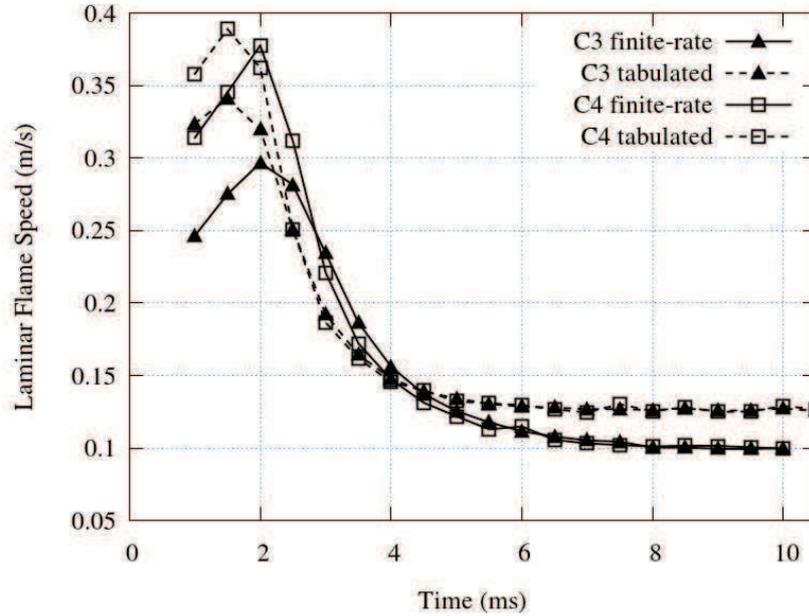


Fig 4.33 – Evolution temporelle de la vitesse laminaire de flamme pour les cas *C3* et *C4* au point 1, réalisé avec les deux modèles de chimie.

La tendance générale des courbes est proche de celle de la vitesse absolue. Le pic maximal semble tout de même plus marqué. Les vitesses laminaires des mélanges riches ne sont pas atteintes durant les premières milli-secondes. La figure 4.32 montre que cette particularité est aussi présente en milieu homogène et qu'elle n'est pas due à la stratification du mélange. L'évolution de la vitesse laminaire est ensuite indépendante du degré de stratification étudié. Cette caractéristique valide les résultats de S. Balusamy [11]. Le temps caractéristique de la décroissance de vitesse, calculé dans la section 4.4.2, est de nouveau retrouvé. Cependant, l'évolution se passe plus tôt que dans les cas mono-dimensionnels.

L'évolution semble légèrement plus lente en chimie complexe, le plateau de vitesse laminaire correspondant au mélange $\varphi = 0.6$ n'est atteint qu'après 7.5 ms alors qu'il est atteint après 5 ms en chimie tabulée. Cette différence n'était pas notable en une dimension où les plateaux étaient atteints au même instant. La diffusion des espèces et l'étirement sont deux raisons qui peuvent expliquer ce phénomène. La vitesse laminaire d'une flamme propane/air de richesse $\varphi = 0.6$ est $s_L = 13.07$ cm/s d'après Cantera. Sur la figure 4.33, on remarque que la chimie tabulée a une légère tendance à surestimer cette valeur tandis qu'elle est sous-évaluée en chimie complexe.

L'évolution de la vitesse laminaire au point 2 est similaire à celle présentée sur la figure 4.33. Pour cette raison, il ne semble pas impératif de la reproduire ici. Comme attendu, le plateau atteint pour le cas *C4* est supérieur à celui du cas *C3* dont le mélange "riche" possède une vitesse laminaire moins élevée.

4.5.6 Effet de l'étirement

Dans cette section, l'influence de l'étirement sur la vitesse de flamme est observée. Un front de flamme se propageant dans un fluide non-uniforme est sujet à l'étirement ainsi qu'à la courbure.

Ces effets entraînent des modifications de la surface de flamme [202]. L'étirement de la flamme est une mesure de ces modifications [32, 121],

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt}, \quad (4.16)$$

où A correspond à la surface de la flamme.

Chung et Law [40] formulent celui-ci grâce à la vitesse absolue du front de flamme,

$$\kappa = \nabla_t \cdot s_{a,t} + (\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{n})(\nabla_t \cdot \mathbf{n}), \quad (4.17)$$

avec s_a la vitesse absolue et \mathbf{n} la normale de la flamme.

Cette définition est particulièrement bien adaptée aux deux points étudiés. La vitesse absolue en ces deux points est en effet normale à la surface. Par conséquent, seul le second terme est conservé. L'étirement s'exprime alors par :

$$\kappa = s_a \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) = s_a \mathcal{C}, \quad (4.18)$$

où R_1 et R_2 sont les deux rayons de courbure principaux de la flamme et \mathcal{C} sa courbure.

Les simulations possédant uniquement deux dimensions, le second rayon de courbure est infini. Les courbes étant suffisamment régulières, il est possible d'écrire une fonction de type $y = f(x)$ aux alentours des points 1 et 2 afin d'obtenir la courbure,

$$\mathcal{C} = \frac{|y|''}{(1 + y'^2)^{3/2}}. \quad (4.19)$$

La vitesse laminaire en fonction de l'étirement est tout d'abord tracée pour le cas $C2$, réalisé avec les deux modèles de chimie, sur la figure 4.34.

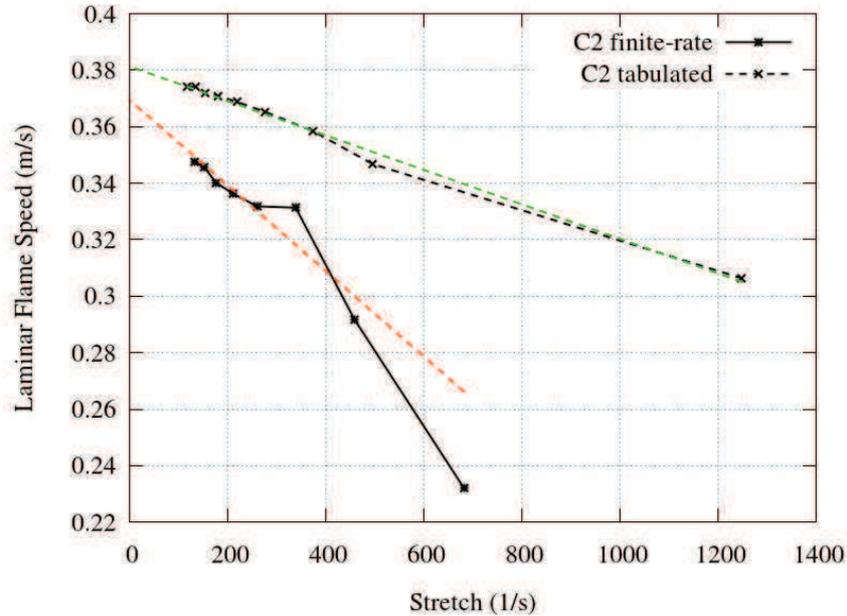


Fig 4.34 – Vitesse laminaire de flamme en fonction de l'étirement pour le cas $C2$, réalisé avec les deux modèles de chimie.

Une évolution linéaire de la vitesse de flamme en fonction de l'étirement est visible pour les deux modèles de chimie. Cette relation linéaire est attendue [117] pour une évolution en milieu

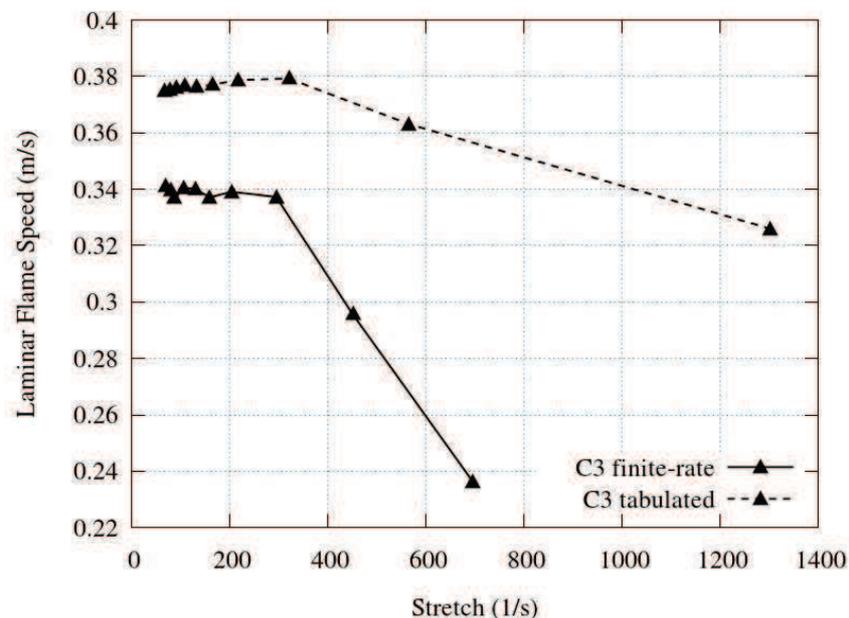
homogène. L'approximation linéaire des courbes est tracée pour les deux modèles de chimie. Le point possédant l'étirement maximal en chimie complexe n'est pas pris en compte lors de l'interpolation linéaire. Ces deux nouvelles droites, en rouge (chimie complexe) et vert (chimie tabulée) pointillés sur la figure 4.34, sont extrapolées jusqu'à étirement nul, afin d'obtenir la vitesse de flamme laminaire non étirée. Le tableau 4.9 répertorie les vitesses de flamme laminaire ainsi obtenues ainsi que celles précédemment calculées dans les cas mono-dimensionnels, donc non-étirés.

	1D	2D
Chimie complexe	36.84	36.95
Chimie tabulée	37.53	38.13

Tableau 4.9 – Vitesse de flamme laminaire en cm/s pour le cas C2, réalisé en 1 et 2 dimensions avec les deux modèles de chimie.

Les valeurs obtenues pour la chimie complexe en une et deux dimensions sont similaires. Un léger écart est visible pour la chimie tabulée, mais ce modèle est connu pour ne pas répondre correctement à la courbure [176].

Pour les cas C3 et C4, la richesse au point 1 évolue temporellement. Il paraît alors difficile de différencier l'influence de l'étirement de celle de la stratification sur l'évolution de la vitesse laminaire de flamme à cet endroit. Par conséquent, seul le point 2 est ici analysé. La vitesse laminaire en fonction de l'étirement est donnée sur la figure 4.35 pour le cas C3 réalisé avec les deux modèles de chimie.



(correspond aux plus grands rayons, à gauche) est aussi linéaire mais possède une pente beaucoup plus faible.

En ce qui concerne la chimie tabulée, la courbe se divise également en deux parties linéaires. Cependant, le signe de la pente est modifié entre les deux parties. La stratification semble ici ralentir la vitesse laminaire pour des faibles taux d'étirement. La vitesse laminaire équivalente à la richesse $\varphi = 0.95$ reste pourtant la cible lorsque la courbe est prolongée vers l'étirement nul.

4.5.7 Dynamique dans les gaz brûlés

Les gaz brûlés, et plus particulièrement la dynamique présente en leur sein, sont ici étudiés. Cette dynamique explique la forme asymétrique de la flamme.

4.5.7.1 Mise en évidence de la dynamique dans les gaz brûlés

Dans la plupart des études sur les flammes en expansion, les gaz brûlés sont considérés au repos [164]. Cependant, Groot and De Goey [72] ont montré dans leur étude sur les flammes sphériques qu'une vitesse apparaissait au sein des gaz brûlés. Cette vitesse étant relativement faible par rapport à la vitesse présente dans les gaz frais, elle est négligée dans la plupart des études.

Un champ de vitesse du cas *C3* réalisé en chimie tabulée est représenté sur la figure 4.36 à $t = 9.5$ ms. Sur cette figure, les gaz brûlés ne sont plus masqués.

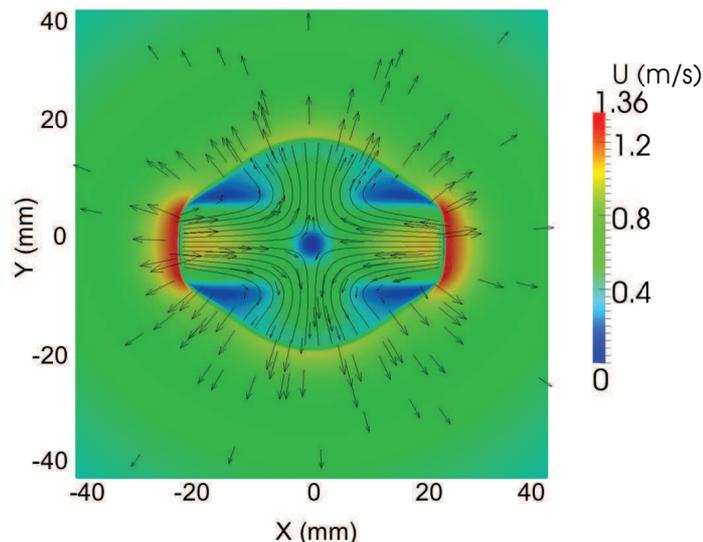


Fig 4.36 – Champ de vitesse instantanée pour le cas *C3*, réalisé en chimie tabulée. Les lignes de courant présentes dans les gaz brûlés sont représentées. Carré de 8 cm de côté.

Cette figure souligne la présence d'un champ de vitesse à l'intérieur des gaz brûlés. Des lignes de courant sont dirigées des gaz riches vers les gaz pauvres. Ce champ de vitesse n'est pas présent dans les cas homogènes. Ce phénomène s'observe aussi dans le cas *C4* et ne dépend pas du modèle de chimie utilisé pour la simulation.

4.5.7.2 Observations et hypothèses

Le domaine de gaz brûlés se divise en deux parties. La première partie provient du mélange riche, et la seconde du mélange pauvre.

L'évolution temporelle des vitesses des gaz frais et des gaz brûlés est observée, figure 4.37. Les localisations correspondantes aux mesures de ces vitesses sont données sur la figure 4.38.

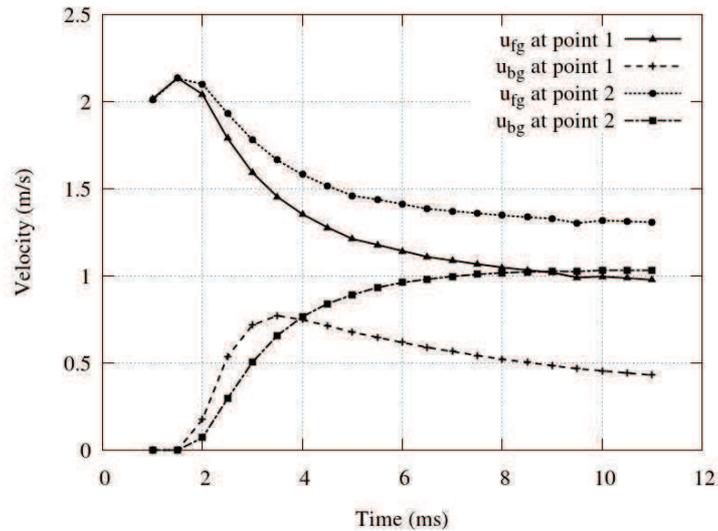


Fig 4.37 – Evolution temporelle de la vitesse des gaz frais et brûlés aux points 1 et 2 pour le cas *C3*, réalisé en chimie tabulée. L'indice *fg* correspond aux gaz frais et *bg* aux gaz brûlés.

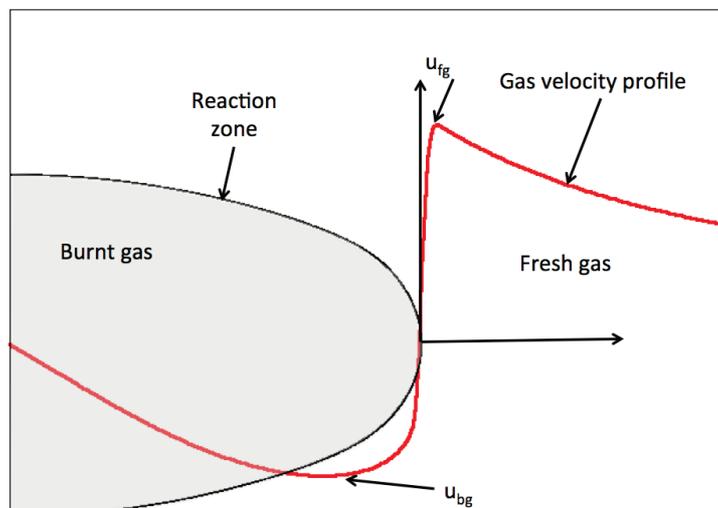


Fig 4.38 – Schéma du profil de vitesse le long de l'axe *X* pour une flamme stratifiée. Représentation des points u_{fg} et u_{bg} où les vitesses des gaz frais et des gaz brûlés sont mesurées.

Ces vitesses ont tendance à atteindre un plateau après quelques milli-secondes. La vitesse dans les gaz brûlés au niveau du point 1 diminue légèrement mais reste très faible. Par conséquent, la flamme est supposée stationnaire après 6 ms. Cette hypothèse forte va permettre de proposer un modèle simplifié pour la détermination de la vitesse absolue. Ce modèle permettra de plus d'avoir une approximation des vitesses dans les gaz brûlés.

Nous venons de voir que le domaine pouvait être divisé en deux parties. Si l'on regarde l'évolution des contours de flamme coloriés par la richesse, figure 4.39, ce fait est confirmé. Une seconde hypothèse est alors posée : les valeurs de la vitesse et des densités (gaz frais et gaz brûlés) de tous les points situés sur le front de flamme du côté riche sont égales. Il en est de même du côté pauvre.

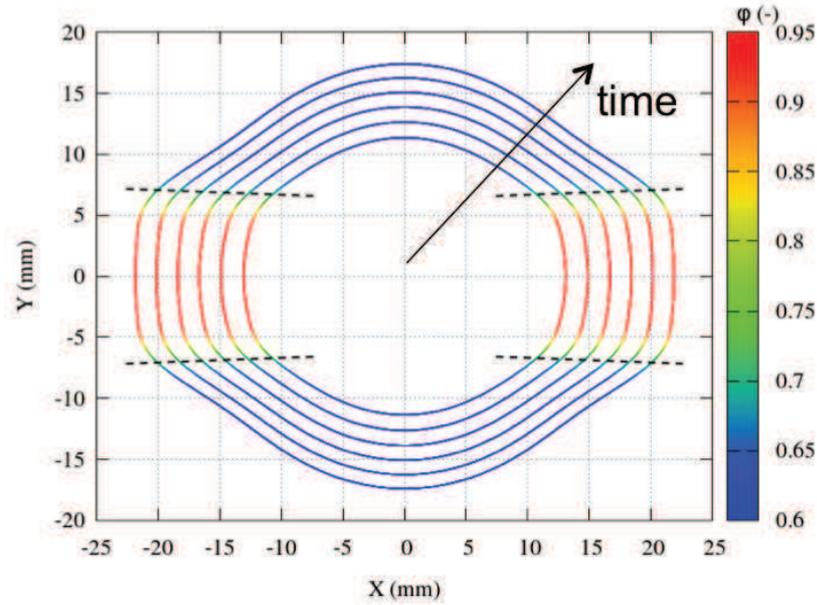


Fig 4.39 – Evolution temporelle des contours de flamme colories par la richesse pour le cas *C3* réalisé en chimie tabulée. Le contour est tracé à chaque milli-seconde, de 6 à 11 ms.

L'iso-richesse $\varphi = 0.7$ est tracée en pointillé.

Les deux hypothèses posées pour le modèle sont :

- vitesses stationnaires à partir de $t = 6$ ms ;
- les vitesses et les densités des points situés sur le front de flamme côté riche sont supposées égales, cela vaut également pour le côté pauvre.

4.5.7.3 Conditions de saut à travers un front de flamme

Avant d'aborder le modèle pour la prédiction de la dynamique dans les gaz brûlés, les conditions de saut à travers un front de flamme sont rappelées.

Dans le référentiel de la flamme, le saut de ρu est nul, par conservation du débit massique à travers la flamme,

$$[\rho(u - s_a)] = 0, \quad (4.20)$$

où s_a est la vitesse absolue de la flamme.

Cette équation permet de déterminer la vitesse dans les gaz brûlés. Il vient,

$$\rho(u - s_a) = \rho_{FG}(u_{FG} - s_a) = \rho_{FG}s_L, \quad (4.21)$$

d'où :

$$\rho_{BG}u_{BG} = \rho_{BG}s_a + \rho_{FG}s_L. \quad (4.22)$$

Les indices *FG* et *BG* correspondent respectivement aux gaz frais (fresh gas) et aux gaz brûlés (burnt gas).

Si les contraintes visqueuses sont négligées, le saut de flux de quantité de mouvement est également nul à travers la flamme,

$$[\rho(u - s_a)u + P] = 0, \quad (4.23)$$

ce qui permet d'écrire dans le référentiel du laboratoire :

$$[\rho u^2 + P] = [\rho]s_a^2. \quad (4.24)$$

4.5.7.4 Modèle pour prédire la dynamique des gaz brûlés

Des lignes de courant dans les gaz brûlés ont été mises en évidence sur la figure 4.36. Pour le modèle, un tube de courant est extrait et représenté sur la figure 4.40.

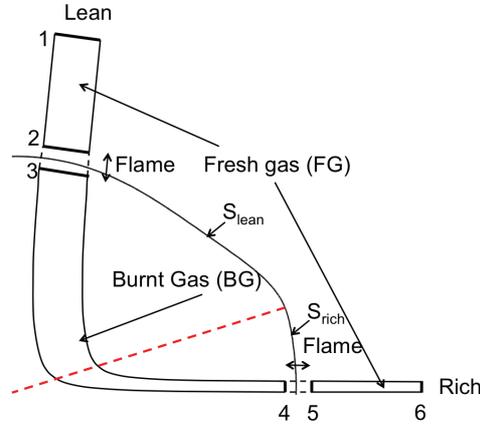


Fig 4.40 – Schéma d'un tube de courant présent dans les gaz brûlés.

Ce tube de courant fixe dans le repère de l'étude est divisé en trois parties. La première est la partie centrale qui contient les gaz brûlés. La seconde partie est composée des deux zones où la flamme se propage. La troisième et dernière partie correspond aux parties extérieures, où les mélanges frais sont présents. Sur le tube de courant, une extrémité est située du côté du mélange pauvre tandis que l'autre est du côté où le mélange est riche.

Le tube de courant est supposé stationnaire. L'écoulement du fluide au sein de celui-ci est considéré comme potentiel. Les flux de quantité de mouvement entrant ou sortant d'une des parties dans les gaz frais sont égaux,

$$F_1 = F_2, \quad (4.25)$$

$$F_5 = F_6, \quad (4.26)$$

avec F le flux de quantité de mouvement,

$$F = (\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} + P)S, \quad (4.27)$$

et les indices 1, 2, 5 et 6 correspondant aux sections notées sur la figure 4.40.

Le tube de courant est supposé stationnaire et par conséquent, les flux de quantité de mouvement dans le sens de propagation de la flamme du côté riche et du côté pauvre de la flamme doivent être égaux afin de minimiser le moment angulaire des forces d'inertie et de pression sur le tube de 3 à 4 et de 1 à 6. Deux nouvelles identités apparaissent,

$$F_1 = F_6, \quad (4.28)$$

$$F_3 = F_4. \quad (4.29)$$

La flamme côté riche se situe entre les points 4 et 5 et le front de flamme côté pauvre est localisé entre les points 2 et 3. Par conséquent, un saut de quantité de mouvement a lieu à ces deux endroits. Les équations précédentes impliquent que le saut du flux de quantité de mouvement entre le point 2 et le point 3 est le même que celui entre le point 4 et le point 5. Toutes les sections des surfaces des tubes de courant doivent être additionnées pour former la

surface entière des gaz brûlés. Si l'on somme tous les tubes de courant et que l'on applique la relation de saut (4.24), l'équation d'équilibre suivante est obtenue :

$$([\rho]s_a^2)_{rich}S_{rich} = ([\rho]s_a^2)_{lean}S_{lean}, \quad (4.30)$$

et une première équation liant la vitesse absolue au rapport des surfaces est déterminée,

$$\frac{S_{lean}}{S_{rich}} = \frac{([\rho]s_a^2)_{rich}}{([\rho]s_a^2)_{lean}}. \quad (4.31)$$

D'une part, les gaz brûlés du tube de courant sont stationnaires. De ce fait, le débit massique est conservé. Ici aussi, les tubes de courant peuvent être additionnés pour former la surface entière des gaz brûlés, ce qui conduit à une seconde équation,

$$(\rho_{BG}|u_{BG}|)_{rich}S_{rich} = (\rho_{BG}|u_{BG}|)_{lean}S_{lean}. \quad (4.32)$$

Si l'on insère l'équation (4.22) dans l'équation (4.32), l'équation suivante est obtenue :

$$(|\rho_{BG}s_a + \rho_{FGSL}|)_{rich}S_{rich} = (|\rho_{BG}s_a + \rho_{FGSL}|)_{lean}S_{lean}, \quad (4.33)$$

ce qui fournit une seconde équation liant le rapport des surfaces à la vitesse absolue, s_a ,

$$\frac{S_{lean}}{S_{rich}} = \frac{(|\rho_{BG}s_a + \rho_{FGSL}|)_{rich}}{(|\rho_{BG}s_a + \rho_{FGSL}|)_{lean}}. \quad (4.34)$$

Le but de ce modèle est tout d'abord de déterminer les valeurs des vitesses absolues de la partie riche et de la partie pauvre grâce au rapport de surface. La densité des gaz frais est trouvée grâce à des flammes en propagation libre précédemment calculées avec Cantera [34]. Il est important d'avoir une valeur de la densité des gaz frais précise car le modèle est extrêmement sensible à cette dernière. Un autre paramètre pour lequel le modèle est sensible est la valeur de coupure de la richesse qui détermine la transition entre la partie pauvre et la partie riche. Deux valeurs sont choisies ici, $\varphi = 0.65$ et $\varphi = 0.7$. Le système d'équations est composé de l'équation (4.31) et de l'équation (4.34). Les rapports de surface sont déterminés dans le post-traitement des simulations. Il s'agit de données géométriques qui peuvent être prédites, contrairement aux vitesses absolues $s_{a,rich}$ et $s_{a,lean}$, qui représentent les inconnues du système. Le modèle est récapitulé table 4.10.

Valeurs de coupure	$\varphi = 0.65$ et $\varphi = 0.7$
Inconnues	$s_{a,rich}$ et $s_{a,lean}$
Equations	$\frac{S_{lean}}{S_{rich}} = \frac{([\rho]s_a^2)_{rich}}{([\rho]s_a^2)_{lean}}$ $\frac{S_{lean}}{S_{rich}} = \frac{(\rho_{BG}s_a + \rho_{FGSL})_{rich}}{(\rho_{BG}s_a + \rho_{FGSL})_{lean}}$

Tableau 4.10 – Résumé du modèle pour prédire la vitesse absolue.

Ce système est résolu à l'aide de Matlab à chaque milli-seconde, de 7 à 11 ms pour le cas *C3* avec les deux modèles de chimie. Les résultats obtenus sont présentés sur les figures 4.41 et 4.42.

Les prédictions du modèle simplifié concordent avec les résultats trouvés numériquement pour les deux modèles de chimie, au bout d'un certain moment. La valeur de transition entre la surface riche et la surface pauvre semble être située entre les deux valeurs étudiées.

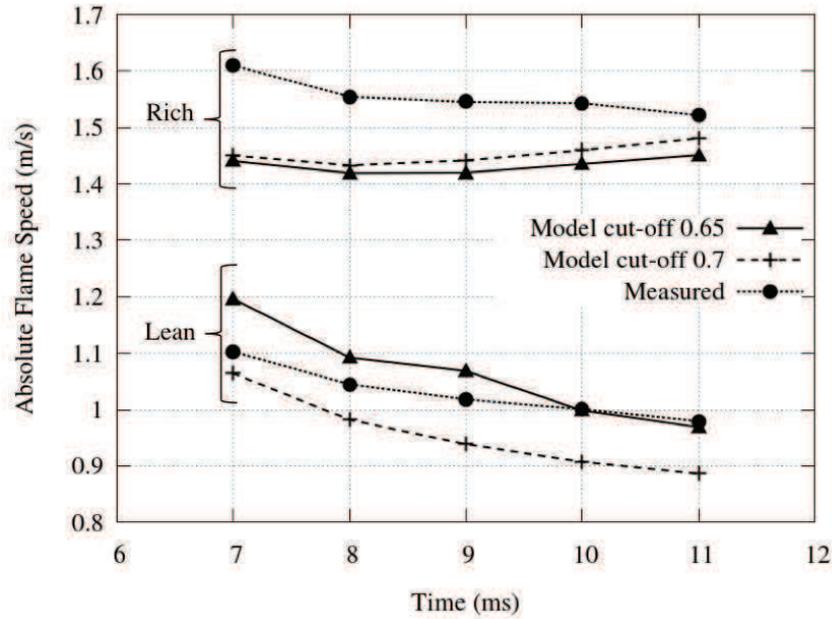


Fig 4.41 – Comparaison de la vitesse absolue mesurée avec les vitesses absolues calculées à partir du modèle. Deux valeurs de transition de surface sont analysées. Cas *C3* réalisé avec la chimie complexe.

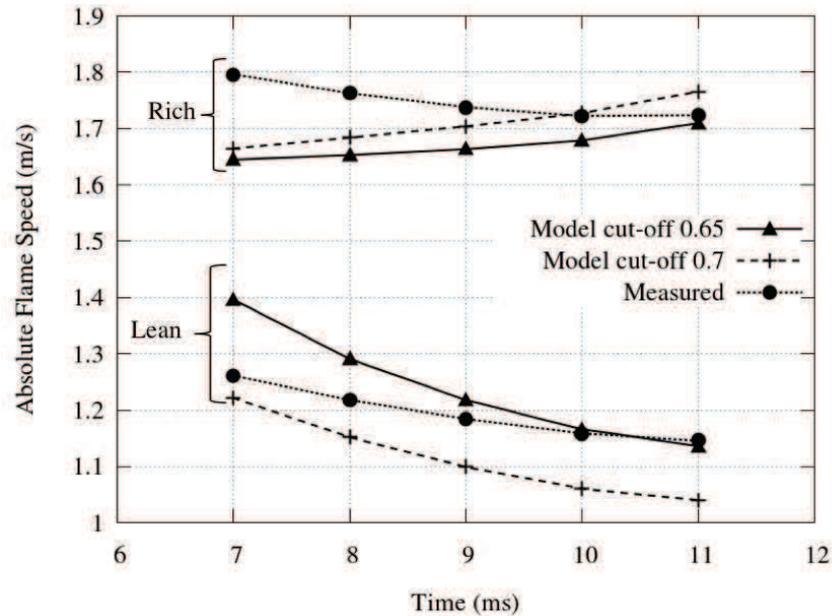


Fig 4.42 – Comparaison de la vitesse absolue mesurée avec les vitesses absolues calculées à partir du modèle. Deux valeurs de transition de surface sont analysées. Cas *C3* réalisé avec la chimie tabulée.

A $t = 11$ ms, les valeurs sont vraiment similaires. En effet, pour la chimie tabulée avec une valeur de coupure égale à $\varphi = 0.65$, le rapport de surface obtenu est 2.28. Les valeurs de vitesse absolue trouvées sont proches de celles mesurées lors de l'analyse directe des résultats numériques qui sont $s_{a,rich} = 1.72$ m/s et $s_{a,lean} = 1.15$ m/s. Grâce à ces valeurs, les vitesses

des gaz brûlés peuvent être déterminées,

$$u_{BG} = s_a + \frac{\rho_{FG}}{\rho_{BG}} s_L. \quad (4.35)$$

Les valeurs obtenues sont $u_{BG,rich} = 1.23$ m/s et $u_{BG,lean} = -0.41$ m/s.

Un modèle permettant de déterminer les vitesses absolues et par conséquent les vitesses dans les gaz brûlés à partir du ratio de surface, soit une donnée géométrique, a été présenté. Ce modèle présente l'avantage d'être facilement exploitable par les expérimentateurs qui ne peuvent pas mesurer les vitesses dans les gaz brûlés. Ce modèle montre de plus que la flamme tend à réduire son asymétrie en homogénéisant l'impulsion qui s'exerce sur son front.

4.6 Modifications de la configuration

Dans la première partie de ce chapitre, l'influence du degré de stratification a été étudiée en une et deux dimensions. Dans cette partie, l'influence de l'épaisseur du gradient réalisant la stratification ainsi que la prise en compte d'une vitesse axiale sont étudiées.

4.6.1 Prise en compte d'une vitesse axiale

Dans la section 2.5.1, les études de Balusamy [11, 13] ont été présentées. L'expérience qu'il réalise en observant une flamme laminaire stratifiée pour un de ces cas est très semblable au cas *C3*. La principale différence réside dans la vitesse axiale qui est présente dans la bande de mélange riche. Cette vitesse est due à l'installation expérimentale. En effet, afin de réaliser un jet stratifié reproductible et contrôlable, le mélange riche injecté dans le volume fermé est aspiré à travers la chambre de combustion à l'aide d'une pompe à vide. La quantité de mélange et la vitesse du jet sont contrôlées par la pression du vide et la durée de la phase d'aspiration. Le cas *C3* est de nouveau simulé avec une vitesse axiale initiale dans la bande de mélange riche afin d'être au plus semblable de l'expérience. Ce nouveau cas est référencé *C5*.

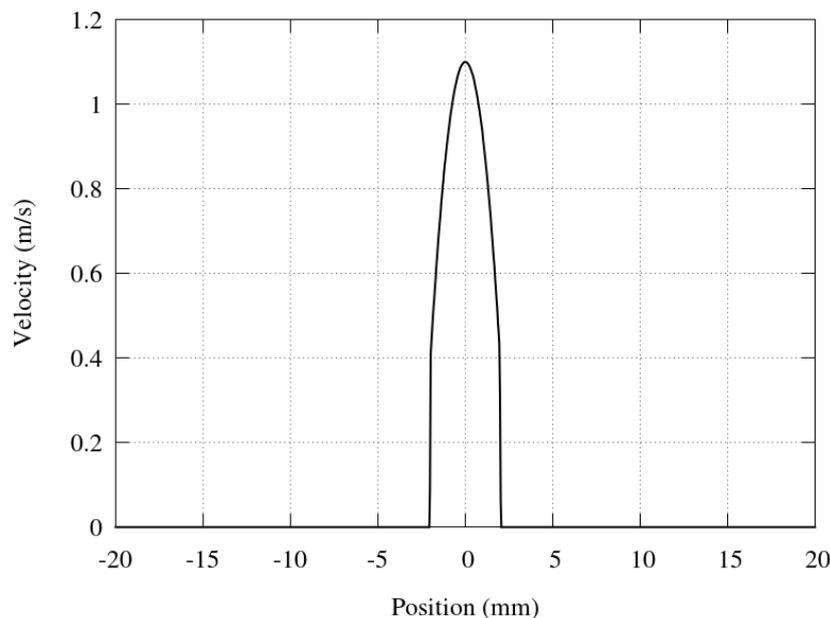


Fig 4.43 – Profil de vitesse axiale le long de l'axe *Y* pour le cas *C5*.

Un profil parabolique est choisi comme profil de vitesse initiale. Ce profil a une largeur de 4 mm, correspondant à la largeur de la bande de mélange riche. La vitesse maximale est prise à

1.1 m/s, ce qui correspond à la vitesse expérimentale. Le profil de vitesse axiale le long de l'axe Y est représenté sur la figure 4.43.

Les courbes présentées jusqu'à présent pour les cas stratifiés pouvaient se décomposer en deux parties : une première représentant le passage du mélange riche vers le mélange pauvre, puis une seconde montrant les effets de la stratification sur le mélange pauvre. Les données issues de l'expérience ne considèrent pas l'étape de transition présente lors du passage du mélange le plus riche vers le mélange le plus pauvre. Les courbes présentées ci-après contiendront donc uniquement la seconde partie du comportement de la flamme. Afin de se comparer au mieux avec l'expérience, le temps initial est modifié. Il est établi sur un rayon de flamme équivalent.

La vitesse du fluide modifie la forme de la flamme, comme le montre la figure 4.44.

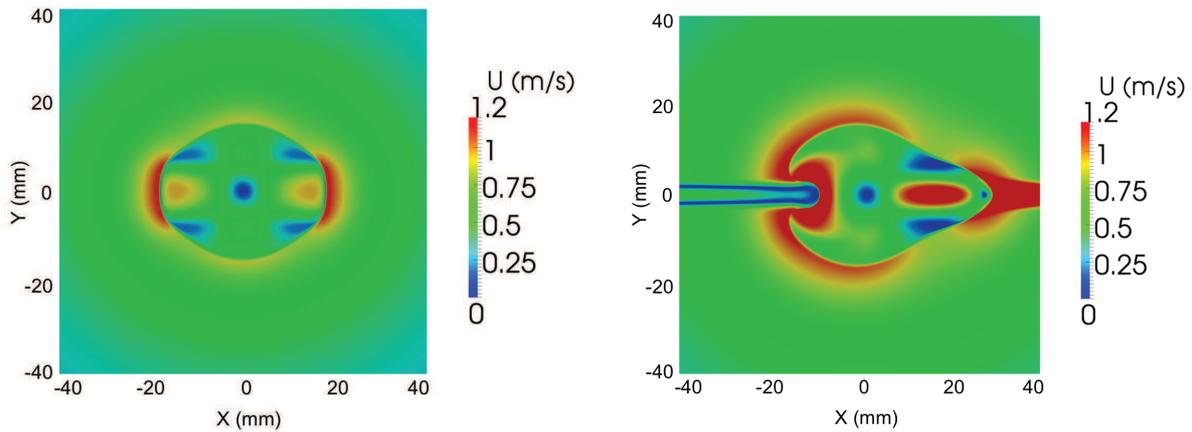


Fig 4.44 – Champ de vitesse du fluide lorsque la flamme est établie, simulation réalisée en chimie complexe. Carré de 8 cm de côté. Gauche : cas $C3$. Droite : cas $C5$.

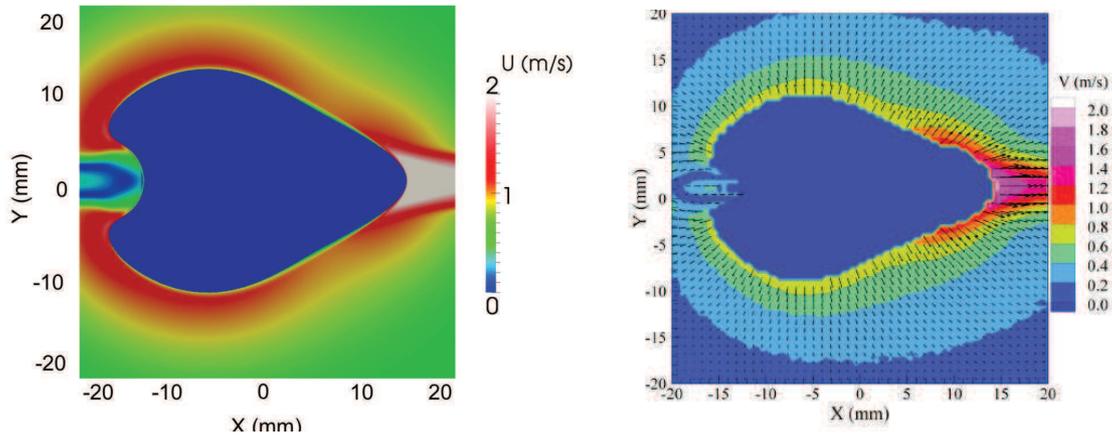


Fig 4.45 – Champ de vitesse du fluide, cas $C5$. Gauche : numérique, chimie complexe. Droite : expérimental, extrait de [11].

Une comparaison entre les résultats numérique et expérimental est donnée sur la figure 4.45. Afin de réaliser cette figure, le temps initial est basé sur une longueur (axe X) équivalente. De plus, le point d'allumage du cas expérimental est légèrement décalé. Ce décalage a été pris en compte pour le cas numérique sur la figure 4.45. Les gaz brûlés ont été masqués sur le cas numérique puisqu'aucune donnée n'est présente pour ceux-ci en expérimental. Sur cette figure, la forme de la flamme est globalement équivalente.

La forme de la flamme étant modifiée, le coefficient d'asymétrie est tout d'abord observé. Celui-ci est tracé pour les cas *C3* et *C5* et est comparé aux données expérimentales, figure 4.46.

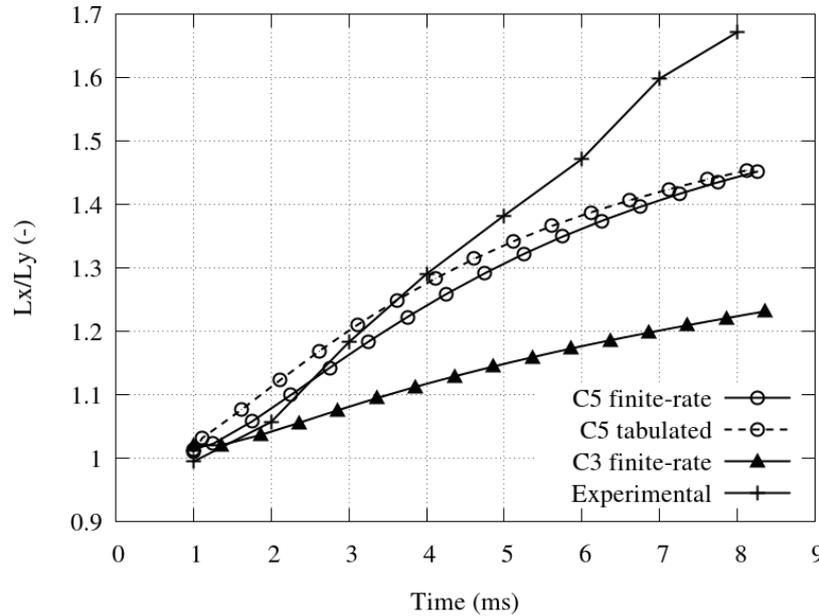


Fig 4.46 – Coefficient d'asymétrie en fonction du temps, basé sur un rayon équivalent pour les cas *C3* et *C5*, réalisés en chimie complexe et en chimie tabulée. Comparaison avec les données expérimentales.

Les coefficients obtenus avec les simulations numériques sont tous inférieurs à ceux obtenus de manière expérimentale. On constate néanmoins que la vitesse axiale joue un rôle essentiel sur ce coefficient. La vitesse du jet dans la direction axiale favorise le développement de la flamme dans cette direction. Le mouvement dans les gaz brûlés est modifié et augmente ainsi la valeur du coefficient d'asymétrie. La vitesse du jet induit aussi un étirement supplémentaire sur la flamme. L'écart présent entre les courbes du cas *C5* réalisé en chimie tabulée et en chimie complexe durant les premières milli-secondes peut s'expliquer par le fait que la chimie tabulée a une mauvaise réponse à l'étirement.

L'écart restant entre les courbes du cas *C5* et les données expérimentales provient du fait que la simulation est réalisée en deux dimensions alors que l'expérience est en trois dimensions. De plus, les profils de vitesse et richesse initiaux sont très proches mais non identiques.

L'évolution de la vitesse laminaire au point 1 est maintenant observée, figure 4.47.

Il est important de noter ici que les données expérimentales ont été interpolées à étirement nul alors que l'étirement n'est pas calculé dans les simulations. Par conséquent, les valeurs des vitesses à un même instant ne peuvent pas être comparées de manière quantitative. La décroissance des courbes peut tout de même être observée. La pente de la simulation en chimie tabulée semble trop importante par rapport aux résultats expérimentaux. A contrario, même si les deux courbes ne se superposent pas, la tendance de la courbe expérimentale est très semblable à celle de la simulation réalisée en chimie complexe.

Les études expérimentales montrent une asymptote qui tend vers $s_L = 6$ cm/s. Cette valeur reste surprenante puisqu'elle est deux fois plus faible que les valeurs trouvées dans la littérature [86, 88, 117, 186]. Les expérimentateurs présumant que cette valeur est due à la configuration. Par conséquent, les résultats présentés ici sont à manipuler avec précaution.

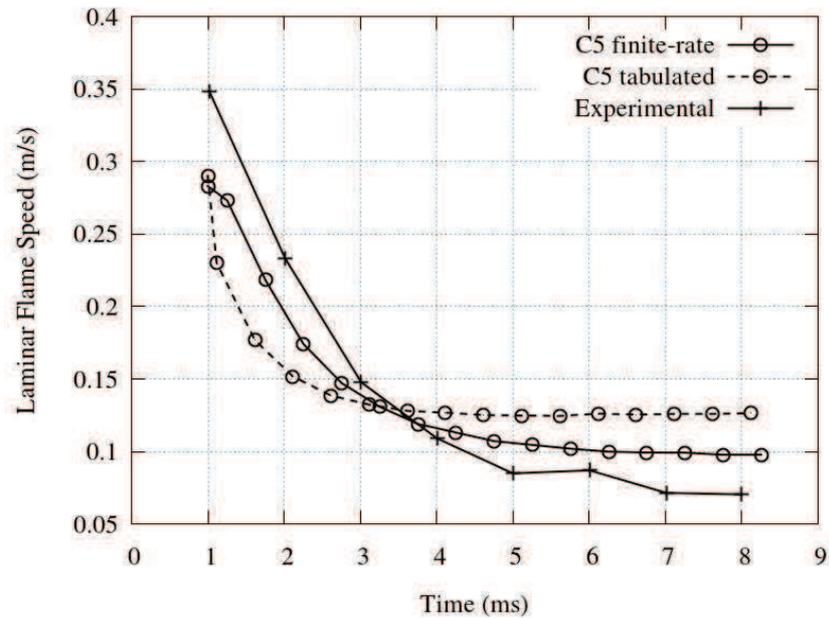


Fig 4.47 – Evolution temporelle de la vitesse laminaire au point 2 pour le cas *C5*, réalisé avec les deux modèles de chimie. Comparaison avec les données expérimentales.

4.6.2 Influence de l'épaisseur du gradient

Les cas étudiés précédemment possédaient la même épaisseur de gradient lors du passage du mélange le plus riche vers le mélange le plus pauvre. Il paraît à présent important d'étudier l'influence de cette épaisseur sur le comportement de la flamme. Pour cela, le cas *C3* est repris, en deux dimensions uniquement, avec la chimie complexe.

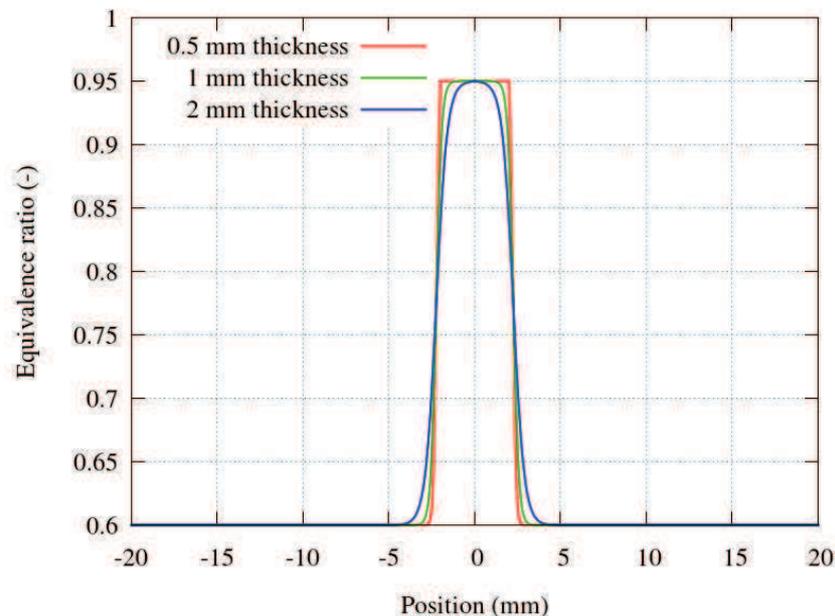


Fig 4.48 – Profil de richesse sur l'axe *Y* au moment de l'allumage pour le cas *C3* avec différentes épaisseurs.

Jusqu'à présent, le passage du mélange riche au mélange pauvre possédait une épaisseur initiale de 0.5 mm. Deux autres épaisseurs de gradient sont ici étudiées, respectivement 1 mm et

2 mm, figure 4.48. Les gradients sont établis de telle manière que le domaine comporte toujours la même quantité de mélange riche.

Les vitesses absolues aux points 1 et 2 sont observées, figures 4.49 et 4.50.

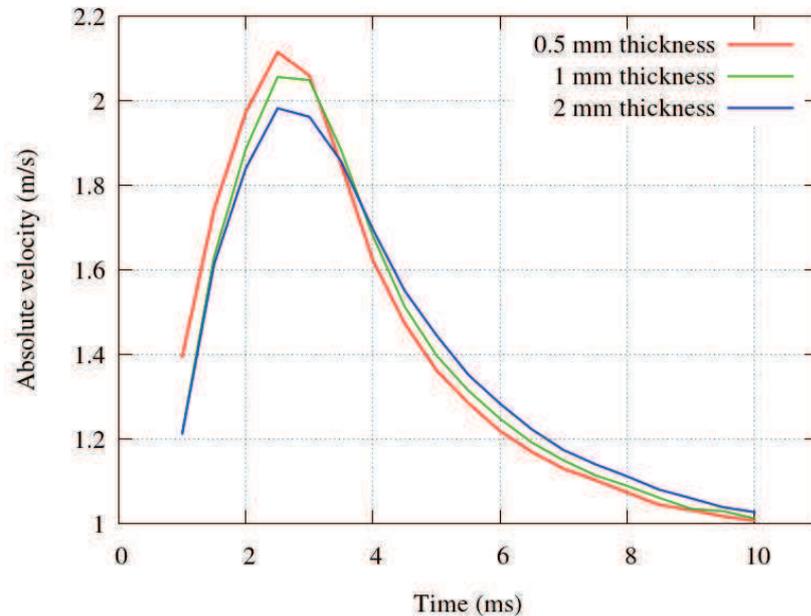


Fig 4.49 – Evolution de la vitesse absolue au point 1 pour différentes épaisseurs de gradient de stratification pour le cas *C3*, chimie complexe.

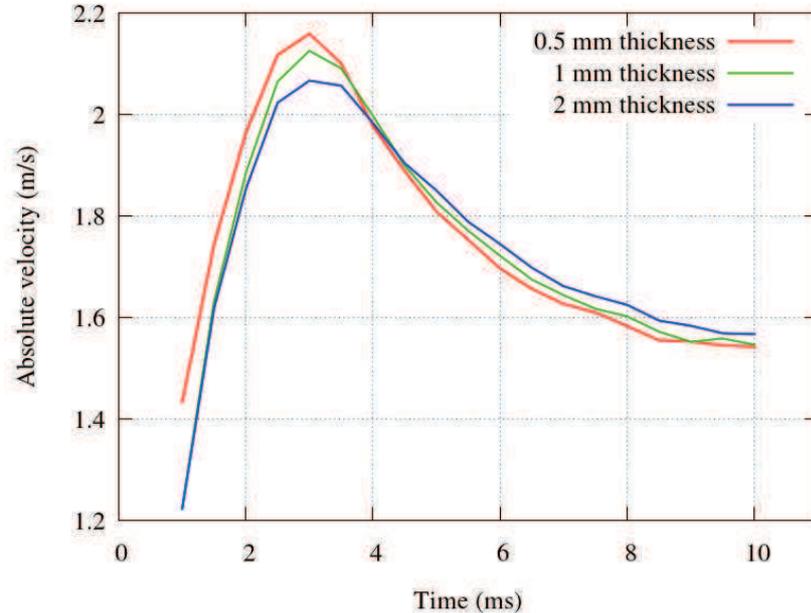


Fig 4.50 – Evolution de la vitesse absolue au point 2 pour différentes épaisseurs de gradient de stratification pour le cas *C3*, chimie complexe.

Les comportements de la vitesse absolue aux voisinages des deux points sont similaires. Moins le gradient est épais, plus la vitesse absolue maximale atteinte est grande. Au contraire, la vitesse absolue devient plus faible lorsqu'elle atteint le mélange pauvre.

Au niveau du point 1, ce comportement peut s'expliquer de la manière suivante. Lorsque l'épaisseur de gradient est très faible, la flamme est plus longtemps en contact avec le mélange

riche, ce qui explique le pic de vitesse absolue. Par contre, le gradient étant très brutal, le mélange pauvre est plus rapidement atteint. Une épaisseur de gradient plus importante correspond à un passage plus lisse entre les deux mélanges. La vitesse maximale est moins forte mais la flamme garde en mémoire son passage par des richesses intermédiaires, qui expliquent la vitesse plus importante à la fin de la simulation. En effet, les propriétés locales de la flamme dépendent à la fois de la composition locale du mélange et de la composition des gaz déjà brûlés. Ces différences restent tout de même minimes.

Un mouvement au sein des gaz brûlés a déjà été mentionné. La combustion issue des gaz les plus riches favorise la combustion du mélange le plus pauvre, et explique la forme moins asymétrique que celle a priori attendue.

Les vitesses laminaires sont maintenant observées, figures 4.51 et 4.52, afin de voir si l'épaisseur du gradient influe sur le temps de relaxation de la flamme.

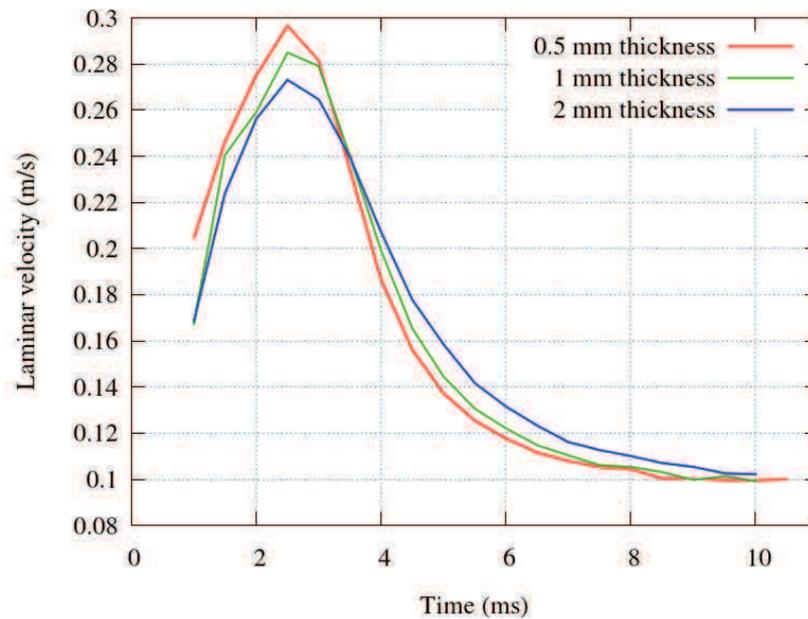


Fig 4.51 – Evolution de la vitesse laminaire au point 1 pour différentes épaisseurs de gradient de stratification pour le cas *C3*, chimie complexe

La vitesse laminaire à proximité du point 1 se comporte comme la vitesse absolue. L'explication fournie pour ce comportement reste ici valable. Le temps de relaxation est plus important lorsque le passage du mélange le plus riche vers le mélange le plus pauvre se fait de manière régulière. A la fin de la simulation, la vitesse absolue du mélange de richesse $\varphi = 0.6$ est bien atteinte pour les trois épaisseurs étudiées. En ce qui concerne le point 2, les comportements sont vraiment analogues et équivalents à celui d'un cas homogène.

Le calcul du temps de décroissance théorique, présenté dans la section 4.4.2, est ici repris. Les résultats obtenus sont listés dans le tableau 4.11. Le temps de décroissance théorique est loin d'être le temps observé sur la figure 4.51 pour le point 1. En effet, il est cohérent pour le gradient d'épaisseur 0.5 mm, où il est égal à $\tau = 3.3$ ms, cependant il est plus court qu'attendu pour des gradients plus épais.

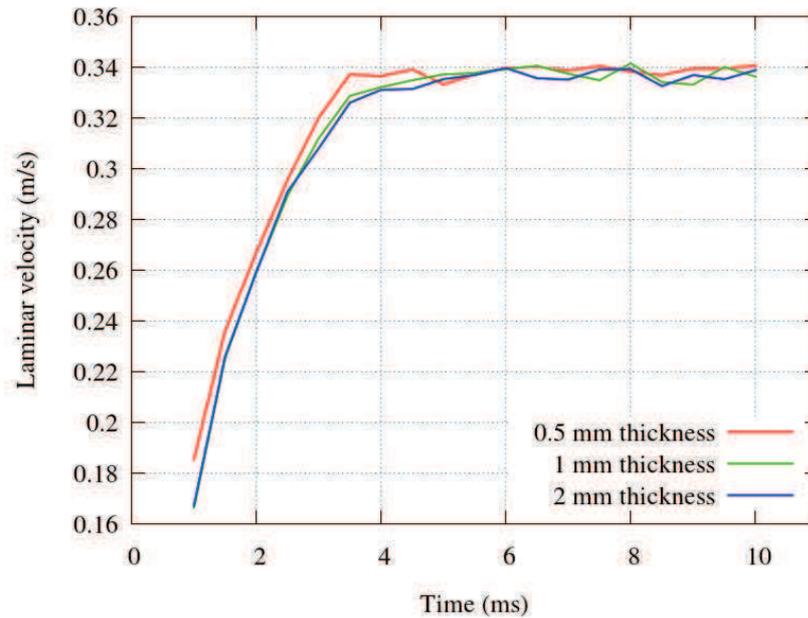


Fig 4.52 – Evolution de la vitesse laminaire au point 2 pour différentes épaisseurs de gradient de stratification pour le cas *C3*, chimie complexe.

Epaisseur du gradient (mm)	Temps de décroissance théorique (ms)	Temps de décroissance réel (ms)
0.5	3.3	3.5
1.0	5.47	4.0
2.0	10.13	4.94

Tableau 4.11 – Temps de décroissance théorique en fonction de l'épaisseur initiale du gradient de Z .

4.7 Conclusion

L'expansion d'un noyau de flamme stratifiée laminaire a ici été analysée. Cette étude possédait deux buts principaux.

Le premier était de valider l'utilisation de la chimie tabulée pour l'évolution d'un noyau en milieu stratifié. Aucune différence notable n'a été observée entre les deux modèles de chimie en ce qui concerne la forme de la flamme, la diffusion de Z ainsi que la dynamique dans les gaz brûlés. La flamme adopte à chaque fois le même comportement, et des valeurs physiques sont retrouvées. Par conséquent, l'utilisation de la chimie tabulée semble justifiée. De plus, nous avons vu que l'initialisation du noyau de flamme en chimie complexe demande une attention particulière. L'effet de diffusion différentielle attendu ne se révèle pas un point déterminant dans la propagation de la flamme. Les espèces diffusant le plus rapidement ne sont pas évaluées de la même manière par les deux modèles de chimie mais n'ont pas d'influence majeure sur le comportement général de la flamme. Les deux modèles sont en effet capables de reproduire la bonne vitesse laminaire de flamme. La principale différence entre les deux modélisations de la cinétique chimique réside dans leur réponse à l'étirement. La chimie tabulée ne semble en effet pas avoir une réponse correcte à l'étirement contrairement à la chimie complexe.

L'autre point portait sur la compréhension du comportement du front de flamme dans un milieu stratifié. Des études mono et bi dimensionnelles ont été réalisées afin de séparer les

effets dus aux différents paramètres. Plusieurs paramètres tels que la forme de la flamme, la diffusion des espèces, la vitesse de flamme ont été observés. Concernant l'asymétrie de la forme de la flamme, celle-ci est moins importante que prévue. Un mouvement au sein des gaz brûlés pouvant expliquer cette forme a été détecté. Ce mouvement a été analysé et un modèle simplifié permettant de relier la vitesse absolue de la flamme au rapport de surface riche/pauvre a été proposé.

Dans une seconde partie, la prise en compte d'une vitesse axiale a été examinée. De même, l'influence de l'épaisseur du gradient de la stratification a été examinée. Un temps de relaxation différent est observable sur la vitesse de flamme laminaire. Cependant, les gradients observés étaient trop proches pour apporter de réelles modifications.

Expansion d'un noyau de flamme turbulent

Sommaire

5.1	Introduction	137
5.2	Présentation de l'étude	138
5.2.1	Configuration expérimentale	138
5.2.2	Caractéristiques et mise en place de l'étude	139
5.2.3	Maillage	139
5.3	Réalisation du mélange	141
5.3.1	Vitesse d'injection	141
5.3.2	Richesse injectée	143
5.3.3	Variation de température et de pression pendant l'injection	143
5.3.4	Injection de la turbulence	146
5.4	Méthodes numériques pour la combustion	147
5.4.1	Table chimique	147
5.4.2	Conditions limites et initialisation du noyau	148
5.4.3	Mesure de vitesse locale à l'aide d'une fonction Level-Set	149
5.5	Analyse du mélange au moment de l'allumage	151
5.5.1	Champs moyens	151
5.5.2	Champs instantanés	154
5.5.3	Structures turbulentes	154
5.6	Propagation de la flamme	156
5.6.1	Effets de la stratification	156
5.6.2	Champs instantanés	158
5.6.3	Contours moyens	159
5.6.4	Contour 3D	160
5.6.5	Analyse de la vitesse de flamme	162
5.6.6	Influence de la courbure	164
5.6.7	Dynamique dans les gaz brûlés	168
5.6.8	Etude de la flamme à l'aide des harmoniques sphériques	172
5.7	Conclusion	175

5.1 Introduction

La propagation d'un noyau en expansion laminaire a été étudiée dans le chapitre précédent. Les phénomènes physiques liés à la stratification y ont été analysés. A présent, un noyau de flamme en expansion dans un milieu turbulent est considéré.

Du fait de la nature *3D* des écoulements turbulents, des simulations en trois dimensions semblent absolument nécessaires pour permettre des analyses pertinentes d'une telle situation.

Le chapitre 4 a démontré la capacité de la chimie tabulée à capter la majorité des phénomènes liés à la stratification. Les effets n'étant pas correctement pris en compte par la chimie tabulée

sont d'une part la réponse à l'étirement et d'autre part une partie de l'effet lié à la diffusion différentielle. Cependant, il a été montré dans le chapitre 4 que l'influence de la diffusion différentielle sur la propagation de la flamme reste minimale. Le coût CPU de la chimie complexe étant sensiblement élevé, il paraît plus intéressant de privilégier l'approche de chimie tabulée FPI lorsque cela est possible. Les simulations présentées dans ce chapitre sont par conséquent uniquement réalisées en chimie tabulée.

Le but de cette thèse étant de comprendre le comportement fondamental de la flamme dans un milieu stratifié/dilué, une configuration simple est adoptée. La configuration étudiée par S. Balusamy [11] est ici reprise. Cette dernière présente en effet l'avantage de se rapprocher d'une simulation de type moteur puisque la flamme évolue dans un domaine fermé. Ces travaux sur les flammes turbulentes vont être reproduits de manière numérique. Une analyse des résultats obtenus complètera les conclusions proposées par S. Balusamy. Le but est ici d'étudier les effets de la turbulence et des hétérogénéités de richesse.

Ce chapitre commence par la description de la configuration expérimentale. Ensuite, les modifications apportées au code pour la réalisation de l'étude sont abordées. Pour finir, une analyse et une comparaison des résultats sont proposées.

5.2 Présentation de l'étude

5.2.1 Configuration expérimentale

Un état de l'art sur les flammes stratifiées a été réalisé dans le chapitre 2. La configuration de S. Balusamy [11] présentée brièvement dans le chapitre 2 est ici détaillée.

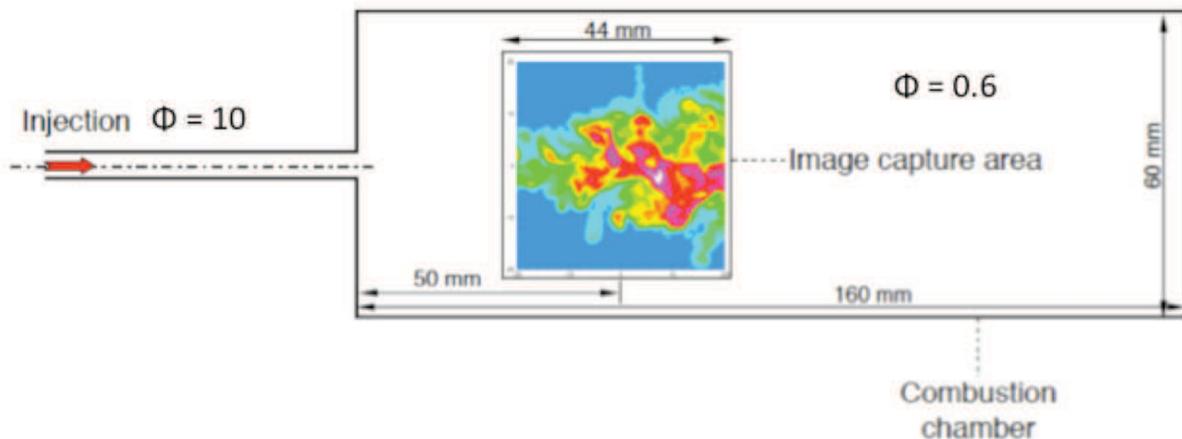


Fig 5.1 – Schéma de la configuration expérimentale et de la fenêtre d'observation, extrait de [11].

Contrairement à la plupart des études sur les flammes stratifiées, l'expansion de la flamme s'effectue ici dans un volume fermé. La configuration consiste en un parallélépipède possédant une section cubique de $60 \times 60 \text{ mm}^2$ et une longueur de 160 mm. La section cubique gauche dispose d'un injecteur d'une longueur de 60 mm et de diamètre 5 mm. Le diamètre constant sur une distance assez longue favorise l'injection axi-symétrique du fluide. Le dispositif expérimental possède une fenêtre de visualisation de $44 \times 44 \text{ mm}^2$ dont le centre est situé à 50 mm de la sortie de l'injecteur. Les mesures s'effectuent dans cette fenêtre de visualisation dans le plan normal à l'axe Z . Un schéma de la configuration est donné sur la figure 5.1.

5.2.2 Caractéristiques et mise en place de l'étude

Initialement, la chambre contient un mélange propane/air au repos de richesse $\varphi = 0.6$ à une température de 300 K et une pression de 1 atm.

L'expérience, et par conséquent la simulation, s'effectuent en deux étapes décrites ci-dessous. La première étape consiste en l'injection instationnaire d'un mélange riche dans la chambre. Cette injection s'effectue à faible nombre de Reynolds, $Re_{jet} = 3475$, ce qui représente un défi d'un point de vue numérique. Durant celle-ci, la stratification du mélange par la turbulence et la vitesse d'injection se réalise. Afin de réaliser une stratification marquée, la richesse du mélange injecté doit être fortement différente de celle du mélange initial.

Dans l'expérience, les conditions présentes au moment de l'allumage sont :

- richesse moyenne au niveau du point d'allumage : $1.1 < \varphi < 1.2$;
- vitesse moyenne au point d'allumage : 1.0 à 1.2 m/s.

Le point d'allumage se situe aux coordonnées $x_{ign} = -8.5$ mm et $y_{ign} = -0.5$ mm relativement au centre de la fenêtre de visualisation, afin que la flamme demeure toujours visible dans la fenêtre de visualisation pendant la durée de l'étude.

Le temps d'injection ainsi que la richesse du mélange injecté représentent des paramètres clés pour atteindre ces conditions. Il a été trouvé de manière expérimentale que le temps d'injection est de 52 ms pour un mélange de richesse $\varphi = 10$ [11].

L'étude porte uniquement sur la stratification en richesse. De ce fait, le mélange riche possède la même température que le mélange pauvre, $T = 300$ K.

L'injection terminée, l'entrée de la chambre est bloquée afin d'obtenir un volume fermé. La seconde partie, nommée combustion, peut ensuite commencer. Dans celle-ci, un noyau de gaz brûlés est initié au niveau du point d'allumage, puis laissé en propagation libre durant 5 ms. Cette durée est relativement courte mais permet d'éviter les interactions de la flamme avec les parois.

5.2.3 Maillage

La configuration expérimentale présentée dans la section 5.2.1 est très mal adaptée à une simulation numérique. Des modifications géométriques doivent être apportées au domaine afin de reproduire au mieux l'expérience. En effet, le système d'injection expérimental étant complexe, il n'est pas possible de mesurer des données dans celui-ci. Par conséquent, le profil de vitesse d'injection a été mesuré à la sortie de l'injecteur, soit à l'entrée de la boîte. De ce fait, il a été décidé de ne pas simuler l'injecteur. Le nouveau domaine est un parallélépipède parfait. Une entrée circulaire de rayon 2.5 mm correspondait au rayon de l'injecteur, est intégrée sur la face cubique gauche.

La décomposition du domaine pour la réalisation du maillage est décrite ci-dessous. Dans la première partie de la simulation, la mise en place de la stratification est observée. Le jet est créé de manière à éviter les interactions avec les parois. Partant de la paroi gauche, un cône tronqué est inséré. La plus petite base coïncide avec l'entrée du domaine pour atteindre un rayon de 25 mm. La longueur du cône est de 20 mm. A la suite de celui-ci est inséré un cylindre de 25 mm de rayon et de 60 mm de long. Ce sous-domaine est centré au niveau de la fenêtre de visualisation. En effet, seule la partie gauche du domaine est étudiée, le maillage est déraffiné dans la partie droite.

Afin d'observer les phénomènes physiques liés à la stratification ainsi que valider l'utilisation de la chimie tabulée pour des cas turbulents, les résultats numériques et expérimentaux vont être comparés. Les résultats expérimentaux sont observés dans la fenêtre de visualisation représentée sur la figure 5.1. Par conséquent, le maillage doit être le plus raffiné à cet endroit. Il s'agit en

effet du lieu où la flamme se développe. Le maillage doit être capable de capter correctement le front de flamme. L'expérience a montré que le rayon maximal des flammes n'excédait pas 30 mm. Par conséquent, une sphère de rayon 30 mm est insérée au centre du cylindre, soit au centre de la fenêtre de visualisation. Une coupe de la décomposition du domaine dans le plan XY montrant les différents volumes est représentée sur la figure 5.2.

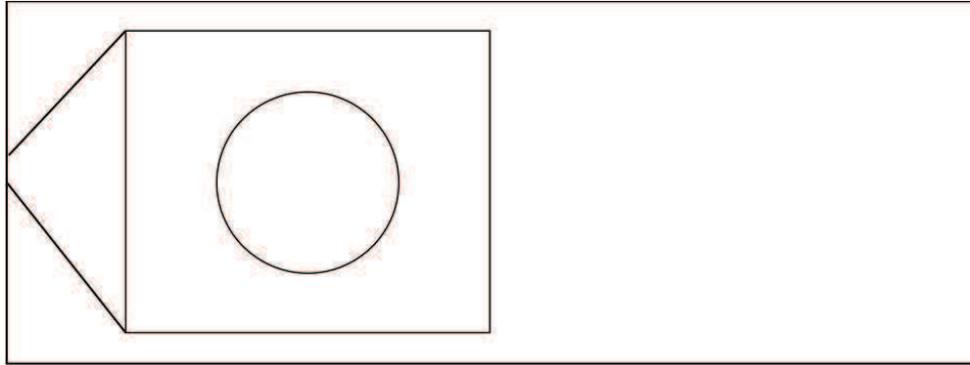


Fig 5.2 – Schéma de la décomposition du domaine pour le maillage.

Afin de trouver la résolution de maillage nécessaire à ces simulations $3D$, une flamme en expansion cylindrique dans un domaine $2D$ est réalisée. Trois maillages possédant des discrétisations spatiales différentes sont utilisés. Leurs caractéristiques sont données dans le tableau 5.1. Les éléments de ces maillages sont des triangles, et le domaine est un cercle de 3 cm de diamètre.

Nom	Nombre d'éléments $\times 10^3$	Discrétisation spatiale (μm)
Grossier	64	148
Intermédiaire	256	74.3
Fin	1024	37.19

Tableau 5.1 – Description des maillages $2D$ pour trouver la résolution nécessaire en $3D$.

Les résultats obtenus sur les maillages intermédiaire et fin sont similaires contrairement à ceux obtenus avec le maillage grossier. Dans ce dernier maillage, la flamme se propage plus lentement. Une taille de maille de $75 \mu\text{m}$ est suffisante pour capturer précisément le front de flamme ainsi que sa vitesse de flamme laminaire.

En $3D$, le domaine est discrétisé à l'aide de tétraèdres. Le maillage est tout d'abord réalisé de manière grossière avec GAMBIT puis raffiné à l'aide d'un algorithme interne afin d'obtenir une résolution suffisamment fine pour bien capter les différents phénomènes physiques. Cet algorithme nécessite un maillage dont la dissymétrie initiale est faible. La dissymétrie est un paramètre définissant la qualité du maillage. Il s'agit du rapport entre la surface optimale de l'élément moins sa surface réelle et sa surface optimale. Une dissymétrie initiale faible est une condition nécessaire pour obtenir un découpage des tétraèdres correct. L'algorithme de raffinement divise chaque tétraèdre en huit tétraèdres et conserve la qualité du maillage initial [159]. Le nouveau maillage possède une discrétisation spatiale deux fois plus fine que le maillage initial.

Un premier maillage de 38 millions de tétraèdres est réalisé. La discrétisation spatiale au niveau de la sphère est de $200 \mu\text{m}$, soit deux points dans le front de flamme. Ce maillage est utilisé pour trouver les paramètres d'injection de la turbulence. Cependant, il reste trop grossier pour capter la structure du front de flamme. Un niveau de raffinement est effectué pour obtenir un maillage de 304 millions d'éléments avec une discrétisation spatiale de l'ordre $100 \mu\text{m}$ dans

la sphère où la flamme se propagera. Les caractéristiques des deux maillages sont résumées dans le tableau 5.2.

Nom du maillage	Nombre de cellules (millions)	Discrétisation spatiale dans la sphère (μm)	Points dans le front de flamme
<i>M1</i>	38	200	2
<i>M2</i>	304	100	4

Tableau 5.2 – Caractéristiques des deux maillages utilisés.

Une densité du maillage raffiné est donnée sur la figure 5.3. Le plan XY est ici colorié par l'inverse des volumes en mm^3 . Les raffinements de la sphère ainsi que du cylindre et du cône sont bien visibles.

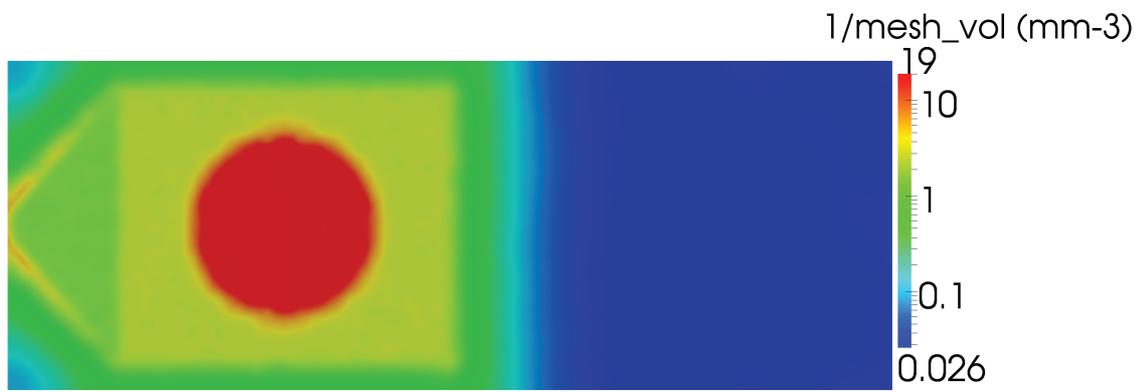


Fig 5.3 – Densité du maillage raffiné dans le plan XY .

Afin de vérifier la qualité du maillage raffiné, le rapport viscosité turbulente sur viscosité moléculaire est observé durant les deux phases de la simulation. Celui-ci est représenté sur la figure 5.4 au moment de l'allumage qui correspond à la fin de l'injection, ainsi qu'après 5 ms de combustion. La valeur maximale de ce rapport n'excède pas 0.3. Pour la plupart des points, la valeur est inférieure à 0.1. Ces valeurs prouvent que la LES est bien résolue et que le modèle de sous-maille ne devrait avoir qu'une influence mineure sur les simulations.

5.3 Réalisation du mélange

Les simulations ont toutes été effectuées sur le ordinateur Babel de l'IDRIS, qui est une machine IBM Blue Gene P. Les paramètres présentés dans cette section sont déterminés grâce au maillage composé de 38 millions de tétraèdres. Les simulations réalisées avec ce maillage sont effectuées sur 256 processeurs. Pour ce maillage, la réalisation de la phase d'injection nécessite 22 h afin de simuler 52 ms physique.

5.3.1 Vitesse d'injection

Dans la section précédente, il a été mentionné que le profil de vitesse d'injection du mélange riche est connu en sortie de l'injecteur. Ce dernier est représenté sur la figure 5.5. La durée d'injection du mélange est de 35 ms. Dans un second temps, l'injection est stoppée et le mélange

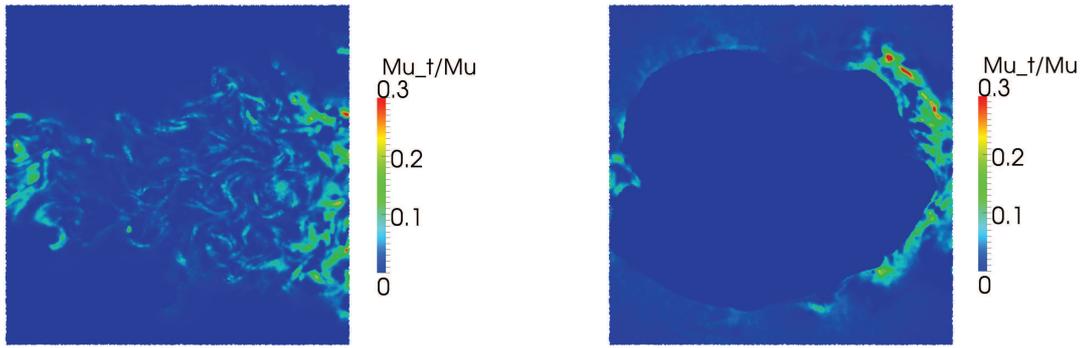


Fig 5.4 – Rapport de la viscosité turbulente sur la viscosité moléculaire dans la fenêtre de visualisation. Gauche : au moment de l'allumage. Droite : 5 ms après l'allumage. Maillage à 304 millions d'éléments.

se propage librement dans le domaine jusqu'au moment de l'allumage. Cette période permet à la stratification du mélange de se former.

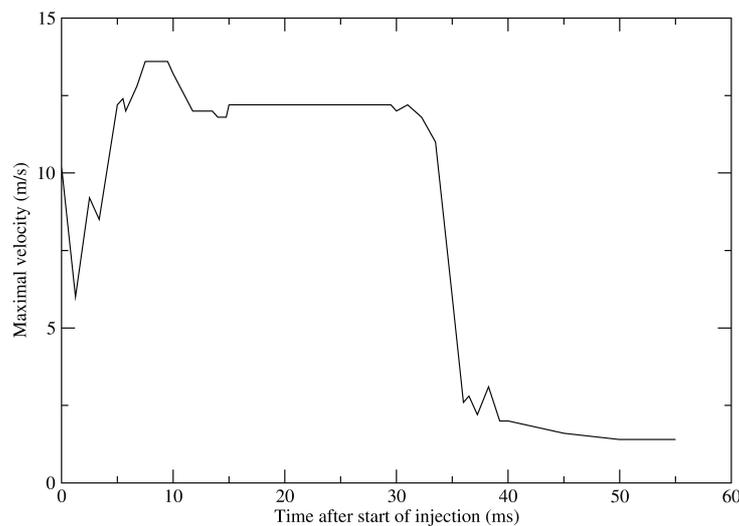


Fig 5.5 – Evolution de la vitesse maximale en sortie de l'injecteur.

L'évolution représentée sur la figure 5.5 a été mesurée par la technique du fil chaud, et correspond à celle de la vitesse maximale. La géométrie de l'injecteur est connue, il s'agit d'un tube possédant une section circulaire. Par conséquent, un profil de type parabolique (vitesse nulle aux parois et maximale à mi-hauteur) se basant sur cette vitesse maximale est imposé en entrée. La vitesse est prise dépendante du rayon par la relation :

$$v(r) = v_{max}(t) \left[1 - \left(\frac{r}{R_{max}} \right)^\alpha \right], \quad (5.1)$$

où R_{max} correspond au rayon de l'injecteur et v_{max} à la vitesse maximale.

La valeur de l'exposant α est adaptée afin d'injecter la bonne quantité de mélange dans la chambre. Dans l'expérience de S. Balusamy [11], un volume de 6.5 cm^3 de mélange riche rentrent dans le domaine. Ce volume V peut être écrit de la manière suivante :

$$V = \int_0^{T_{max}} \int_0^{R_{max}} 2\pi r v(r) dr dt. \quad (5.2)$$

En résolvant cette équation, la valeur de α est déterminée. Elle est trouvée égale à 5.799.

5.3.2 Richesse injectée

Dans l'expérience, le mélange injecté dans la chambre est riche, $\varphi = 10$, tandis que le mélange initialement présent dans la chambre et l'injecteur est pauvre, $\varphi = 0.6$. Le mélange riche rencontre tout d'abord le mélange pauvre dans l'injecteur puis pénètre dans la chambre. Le mélange arrivant dans la chambre possède une richesse comprise entre celles des deux mélanges. Dans la simulation numérique, l'injecteur n'est pas représenté. La formation du mélange entre le jet riche et le fluide contenu dans l'injecteur n'est pas prise en compte. La richesse du mélange pénétrant dans la chambre doit être calculée.

Le mélange équivalent est composé d'une partie riche et d'une partie pauvre. Les dimensions de l'injecteur permettent de déterminer le volume de ce dernier :

$$V_{pauvre} = \pi R^2 \times h = \pi \times (2.5 \times 10^{-3})^2 \times (60 \times 10^{-3}) = 1.178 \text{ cm}^3. \quad (5.3)$$

avec R le rayon de l'injecteur et h sa longueur. La quantité totale de mélange pénétrant dans la chambre est une donnée de l'expérience, $V_{inj} = 6.5 \text{ cm}^3$. Par conséquent, le volume riche injecté est déterminé, $V_{riche} = V_{inj} - V_{pauvre} = 5.32 \text{ cm}^3$.

Les richesses des mélanges pauvre et riche sont connues, $\varphi_{riche} = 10$ et $\varphi_{pauvre} = 0.6$. La masse molaire de chaque mélange peut être déterminée par :

$$W_{mel} = \sum_{k=1}^N X_k W_k, \quad (5.4)$$

où X_k et W_k représentent respectivement la fraction molaire et la masse molaire de l'espèce k . Les valeurs suivantes sont obtenues : $W_{riche} = 33.3 \text{ g/mol}$ et $W_{pauvre} = 29.21 \text{ g/mol}$.

Grâce à celles-ci les densités des différents mélanges peuvent être trouvées :

$$\rho = P/rT, \quad (5.5)$$

avec $r = R/W_{mel}$ et $R = 8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ la constante des gaz parfaits. Pour rappel, les gaz frais possèdent la température $T = 300 \text{ K}$ et sont à la pression atmosphérique. Les densités sont alors $\rho_{riche} = 1.35 \text{ kg/m}^3$ et $\rho_{pauvre} = 1.19 \text{ kg/m}^3$.

Les volume des différents mélanges et leurs densité étant connus, il est maintenant possible de déterminer la masse, m , de chaque mélange :

$$m = \rho V, \quad (5.6)$$

soit $m_{riche} = 7.2 \text{ g}$ et $m_{pauvre} = 1.4 \text{ g}$.

La masse totale correspondant au mélange équivalent est ainsi déterminée, $m_{eq} = m_{pauvre} + m_{riche} = 8.6 \text{ mg}$. Grâce à la masse du mélange équivalent et à son volume, sa densité puis sa richesse sont calculées, en suivant le raisonnement inverse à celui tout juste présenté.

Un récapitulatif des différentes valeurs obtenues pour les trois mélanges, respectivement équivalent, pauvre et riche est donné dans le tableau 5.3.

Le mélange injecté dans la simulation possédera la richesse $\varphi = 7.6$.

5.3.3 Variation de température et de pression pendant l'injection

Le volume étudié étant un volume fermé, il est important de prendre en compte l'augmentation de pression et de température pendant la phase d'injection.

	Volume (cm ³)	Richesse (-)	Densité (kg/m ³)	Masse (mg)
Equivalent	6.5	7.6	1.324	8.6
Pauvre	1.178	0.6	1.19	1.4
Riche	5.322	10.0	1.35	7.2

Tableau 5.3 – Récapitulatif des caractéristiques des mélanges injectés dans la chambre.

Le code YALES2 est un code qui résout les équations de Navier-Stokes sous l'approximation de faible nombre de Mach. Par conséquent, la pression thermodynamique est uniforme dans le domaine. Une augmentation temporelle de pression doit par contre être prise en compte.

Le volume total de la chambre est de 576 cm³ et celui du mélange injecté est de 6.5 cm³. De ce fait, le volume injecté ne représente que 1.12% du volume total.

Le premier principe de la thermodynamique permet d'approcher la température dans la boîte à la fin de l'injection. Les temps d'évolution étant très courts (de l'ordre de quelques milli-secondes), la transformation est supposée adiabatique, $\Delta Q = 0$, et l'énergie cinétique est négligée.

L'état initial (EI) est connu, ainsi que les caractéristiques du mélange injecté. L'état final (EF) correspond à l'état initial auquel le mélange injecté est ajouté. La variation entre les deux états, ΔU , est donc :

$$\Delta U = U_{EF} - U_{EI} = P_{inj} V_{inj}, \quad (5.7)$$

Ce qui permet de déterminer la température finale,

$$T_f = \frac{P_{inj} V_{inj} + T_{ini}(m_{ini} C_{v,ini} + m_{inj} C_{v,inj})}{m_{fin} C_{v,fin}}. \quad (5.8)$$

L'application numérique donne $T_f = 302.3$ K.

La variation de température pendant la phase d'injection étant minimale, celle-ci est négligée.

Initialement, une augmentation linéaire de la pression durant la phase d'injection a été envisagée. Les données expérimentales étant connues en fin d'injection, il aurait été possible de déterminer la pression finale grâce à l'équation d'état des gaz parfaits.

Cependant, la mise en place d'une richesse équivalente ne permettait pas de savoir si la richesse globale à la fin de l'injection serait exactement la même que dans l'expérience. En outre, du fait de l'approximation faible nombre de Mach, le mélange injecté possède la même pression que le mélange dans la boîte, contrairement à l'expérience, ce qui peut là aussi entraîner une modification de la richesse globale finale.

Lors de la mise en place de la simulation, deux coefficients d'augmentation de pression sont testés pour vérifier leur influence sur la longueur de pénétration du jet. Les résultats sont visibles sur les figures 5.6 et 5.7 pour des coefficients égaux à $dP_0/dt = 21230$ Pa/s et $dP_0/dt = 25263$ Pa/s. Ceux-ci correspondent respectivement à l'augmentation de pression obtenue après injection d'un mélange de richesse $\varphi = 7.6$ et $\varphi = 10$, pour une pression d'injection supérieure à la pression dans la chambre. La longueur du jet est fortement dépendante de ce coefficient.

Jangi *et al.* [85] proposent une augmentation de pression basée sur l'intégration de la loi des gaz parfaits. La masse injectée au cours du temps étant connue, cette méthode est implantée dans YALES2.

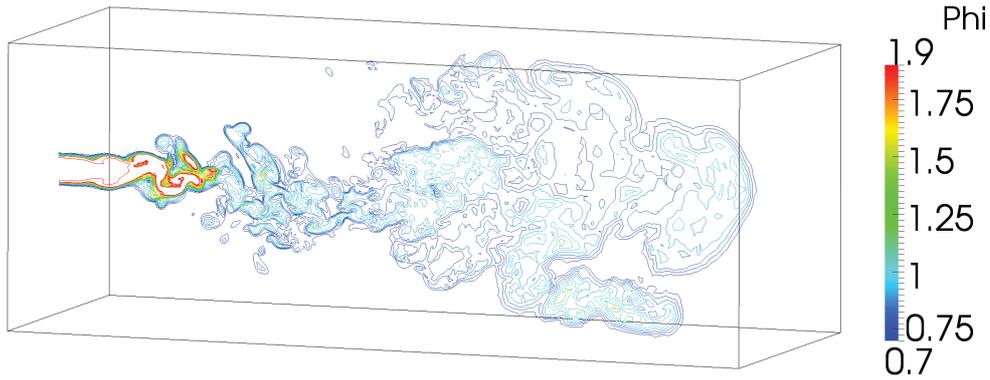


Fig 5.6 – Simulation de la phase d’injection avec le maillage 38 millions. Contour de la richesse φ , avec une augmentation linéaire de pression, $dP_0/dt = 21230 \text{ Pa/s}$, 52 ms après le début de l’injection.

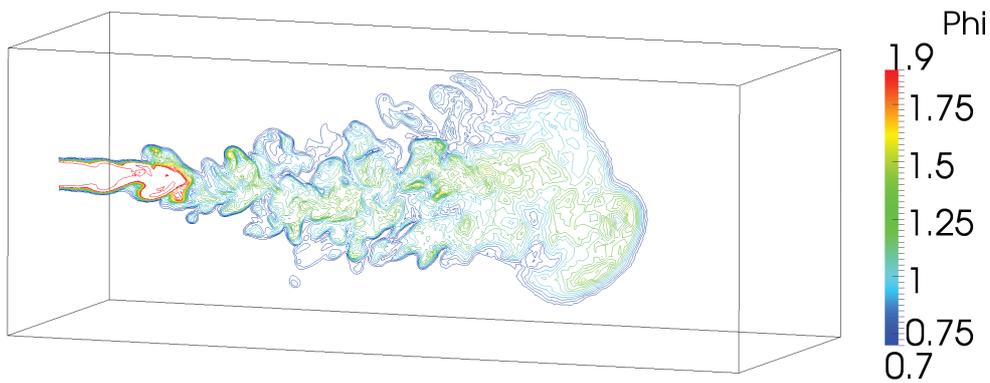


Fig 5.7 – Même figure que la figure 5.6 mais avec $dP_0/dt = 25263 \text{ Pa/s}$. Les différences de forme et de pénétration sont clairement visibles.

La pression dans l’équation d’état est évaluée selon,

$$P_0^* = \frac{\int_V \rho^* dV}{\int_V [r^{LUT}(\phi^*) \cdot T^{LUT}(\phi^*)]^{-1} dV}, \quad (5.9)$$

où l’exposant LUT signifie "Look-Up Table", les valeurs sont prises directement dans la table chimique. Les étoiles signifient qu’il s’agit de valeurs prédites dans une étape précédente de l’intégration temporelle. Cette nouvelle valeur de pression P_0^* sert à déterminer la valeur de la densité locale,

$$\rho^{n+3/2} = \frac{P_0^*}{r^{LUT}(\phi^*) T^{LUT}(\phi^*)}. \quad (5.10)$$

La pression dans la chambre de combustion évolue aussi durant la phase de combustion, du fait de l’expansion thermique des gaz brûlés. Par conséquent, cette méthode est mise en place

pour les deux phases, injection et combustion.

5.3.4 Injection de la turbulence

De la turbulence doit être injectée en entrée du domaine pour simuler la turbulence présente dans l'expérience. Celle-ci est générée à l'aide d'un solveur spectral à partir d'un spectre de Passot-Pouquet [134] :

$$E(k) = 16\sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{u_{rms}^2}{k_0} \left(\frac{k}{k_0}\right)^4 e^{-2\left(\frac{k}{k_0}\right)^2}. \quad (5.11)$$

Ce spectre présente l'avantage de pouvoir être réglé facilement à l'aide de deux paramètres. Le nombre d'onde $k_0 = 2\pi/L_0$ est lié à l'échelle intégrale. Le second paramètre correspond aux fluctuations de vitesse, soit l'énergie cinétique totale du domaine.

Dans l'expérience, la turbulence est créée par le passage du mélange dans les deux solénoïdes présents en aval de l'injecteur, puis continue d'augmenter dans ce dernier. S. Balusamy donne des indications sur les fluctuations de vitesse au moment de l'injection. Cependant aucune donnée n'est fournie concernant l'échelle intégrale. Ces deux données sont nécessaires pour introduire une turbulence homogène isotrope dans la simulation. Une recherche paramétrique est effectuée afin d'évaluer ce paramètre. Il est en effet montré dans différentes études [14, 21, 131] que la topologie d'un jet est fortement dépendante des conditions turbulentes initiales. La validation de l'échelle intégrale est ici basée sur la longueur de pénétration du jet 19 ms après le début de l'injection. Cet instant est choisi car c'est l'unique moment où des données sont présentes dans la thèse de S. Balusamy entre le début de l'injection et le moment de l'allumage. Il est remarqué, et illustré sur les figures 5.8 et 5.9, lors de ces essais que plus l'échelle intégrale est grande, plus la longueur de pénétration est courte. Dans ce cas, le jet a tendance à se propager dans les directions transverses.

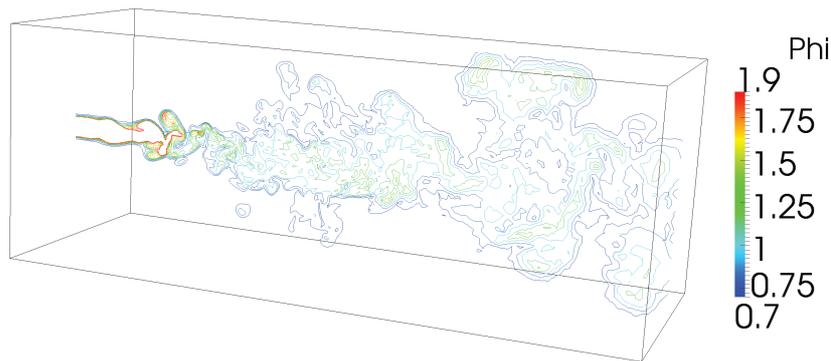


Fig 5.8 – Iso-contour de la richesse 52 ms après le début de l'injection, échelle intégrale égale à 0.4 mm.

La longueur finalement retenue est 1.4 mm, valeur proche du rayon de l'injecteur. Les champs de fraction de mélange expérimental et numérique ainsi obtenus à $t = 19$ ms après le début de l'injection sont représentés sur la figure 5.10.

Ces figures montrent bien que la longueur ainsi que la largeur du jet sont correctement reproduites pour ces paramètres de turbulence initiaux.

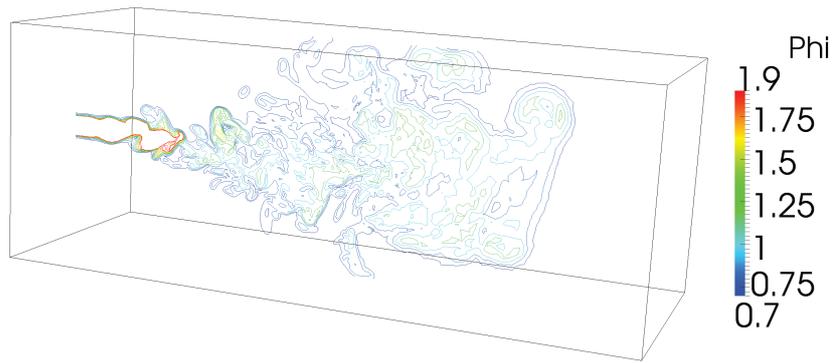


Fig 5.9 – Iso-contour de la richesse 52 ms après le début de l'injection, échelle intégrale égale à 1.4 mm.

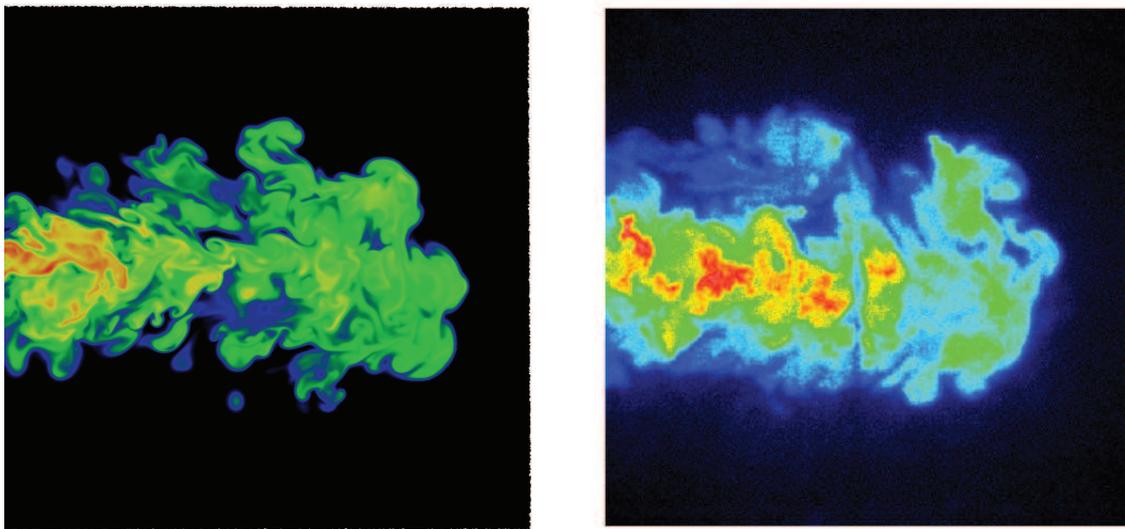


Fig 5.10 – Reproductibilité du jet 19 ms après le début de l'injection. Gauche : LES. Droite : expérience. La longueur de pénétration du jet est en accord avec les résultats expérimentaux.

5.4 Méthodes numériques pour la combustion

5.4.1 Table chimique

La méthode PCM-FPI présentée dans les sections 3.5.2.3 et 3.6.3.1 est ici utilisée.

L'étude se basant surtout sur la vitesse de flamme, le schéma cinétique de Jerzembek-Pepiot [86] est choisi pour décrire la combustion propane/air. Ce dernier donne en effet des vitesses de flamme laminaire en accord avec les résultats expérimentaux pour la plupart des hydrocarbures.

La table chimique a été réalisée à l'aide de Cantera [34]. La variable de progrès est définie de la même manière que dans la section 4.2.5, soit $Y_C = Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H_2O}$, pour éviter tout point de rebroussement. Afin d'être plus précis, l'index des valeurs tabléées de la fraction de mélange est centré autour de la stoechiométrie puis s'élargit dans les domaines de non-flammabilité. L'index de la variable de progrès est quant à lui régulier sur tout son intervalle [0 : 1]. La table est réalisée pour une unique température et une unique pression initiale. Les résultats expérimentaux de Balusamy [11] montrent en effet que l'augmentation de pression durant la

phase de combustion n'excédera pas 2%.

La simulation réalisée étant une LES, il est important d'introduire une variance de sous-maille pour la variable de progrès. Le but de cette simulation est aussi d'avoir un maillage assez raffiné pour considérer Z constant dans une cellule, c'est-à-dire une fonction de sous-maille de type Dirac.

En ce qui concerne le facteur de ségrégation de la variable d'avancement, il est défini à l'aide de la loi de mélange [124, 138], donnée par l'équation (3.149) et rappelée ci-après :

$$S_C = \frac{C_S \Delta^2 |\nabla \tilde{C}|^2}{\tilde{C}(1 - \tilde{C})}. \quad (5.12)$$

La taille de filtre Δ est une variable locale et égale à la taille de la maille.

Cette définition peut être utilisée puisque la simulation est bien résolue. La constante du modèle, C_S , est prise égale à 0.08.

La table finale est basée sur 5 paramètres :

1. la température initiale $T_{ini} = 300$ K ;
2. la pression initiale $P_{ini} = 101325$ Pa ;
3. la fraction de mélange Z ;
4. la variable de progrès normalisée C ;
5. la ségrégation de la variable de progrès S_C .

Pour les simulations, le nombre de Schmidt de la fraction de mélange est pris égal à $Sc_Z = 1.36$ et celui de la variable de progrès à $Sc_C = 0.725$.

Au regard de la variance de la variable de progrès dans la sphère raffinée, représentée après 4 ms de combustion sur la figure 5.11, la simulation peut être qualifiée de LES très résolue. En effet, la variance n'excède pas 0.015 ce qui est négligeable.

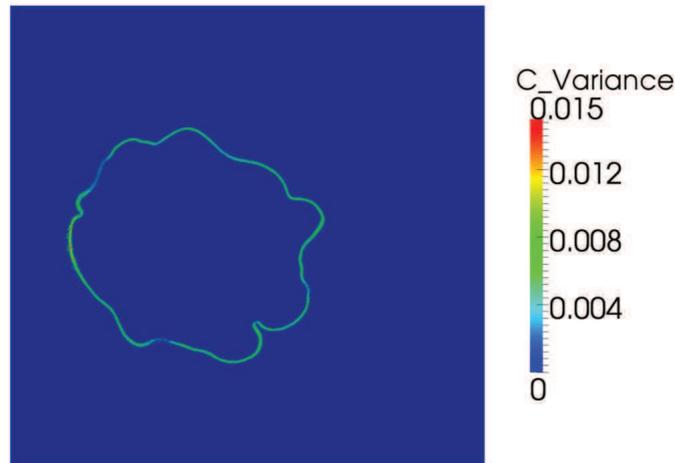


Fig 5.11 – Variance de la variable de progrès dans la fenêtre de visualisation 4 ms après l'allumage. Maillage à 304 millions d'éléments.

5.4.2 Conditions limites et initialisation du noyau

Pour l'élaboration de la phase de combustion, il est nécessaire de changer les conditions limites à la fin de la phase d'injection. Cette seconde phase se déroule en effet dans un volume

fermé. La précédente entrée est maintenant définie en tant que mur. Le mélange est allumé de manière forcée grâce à l'introduction d'un noyau de gaz brûlés. Pour être le plus comparable possible à l'expérience, le point d'allumage est pris à l'identique. Dans l'expérience, le mélange est allumé grâce à deux électrodes, en apportant le minimum d'énergie possible pour allumer le noyau. Cependant, il n'est pas possible de quantifier cette énergie expérimentalement. La taille du noyau introduit dans les simulations est adaptée afin d'atteindre une taille similaire au noyau expérimental après 1 ms. Un noyau de rayon 3 mm est typiquement obtenu.

5.4.3 Mesure de vitesse locale à l'aide d'une fonction Level-Set

5.4.3.1 Description et implantation de la méthode

Le but est ici de déterminer les effets dus à la stratification. Pour cela, une mesure de vitesse locale au niveau du front de flamme est mise en place grâce à la méthode de level-set [132].

La level-set sert à suivre une iso-valeur de la variable de progrès. Cette dernière sert de critère pour délimiter le contour de flamme. La valeur suivie est déterminée grâce à des simulations 1D préliminaires. La valeur de la variable de progrès où le terme source est maximal est choisie et est trouvée égale à 0.73 comme représenté sur la figure 5.12.

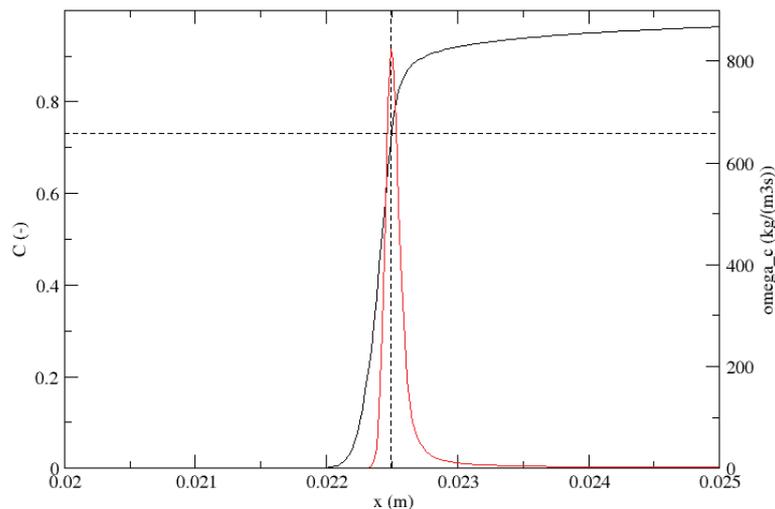


Fig 5.12 – Recherche de la valeur de la variable de progrès pour laquelle le terme source est maximal.

La level-set permet de calculer des normales ainsi que des distances à une iso-surface rapidement. Un schéma de la méthode est représenté sur la figure. 5.13.

La mesure de vitesse s'effectue en deux temps. Au temps t (partie gauche de la figure 5.13) :

1. l'iso-contour numéroté 1 correspondant à $C = 0.73$ est déterminé et stocké grâce à la level-set ;
2. les normales à cet iso-contour, \mathbf{n}_t , sont calculées et stockées ;
3. les distances, d_t , entre chaque point du maillage et l'iso-surface sont mesurées et conservées.

Au temps $t + \Delta t$ (partie droite de la figure 5.13) :

1. l'iso-surface $C = 0.73$ est déterminée, notée 2 sur la figure 5.13 ;

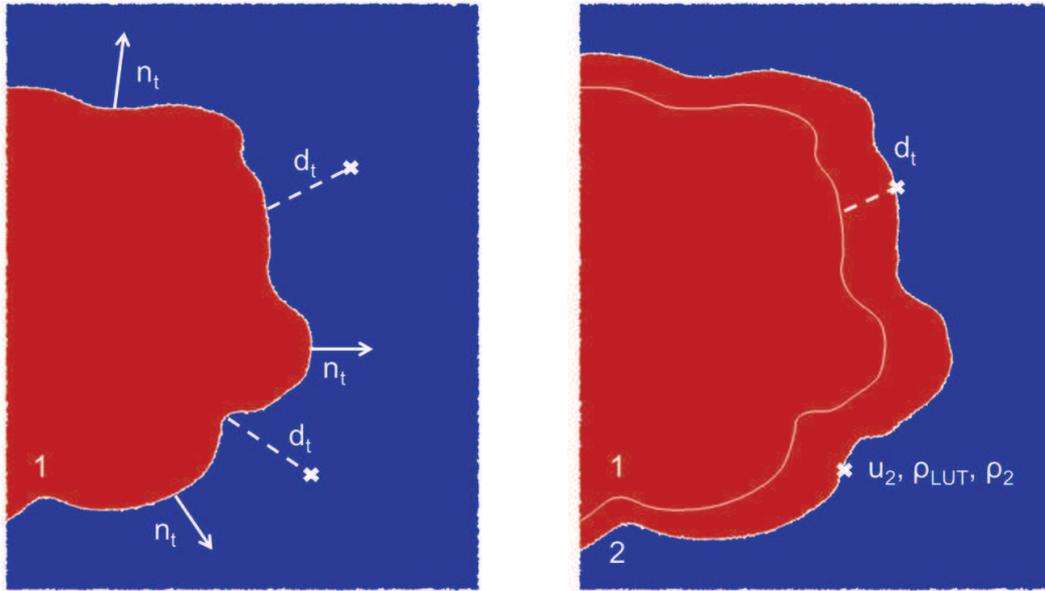


Fig 5.13 – Mesure de vitesse de flamme laminaire étirée grâce à un suivi de flamme par level-set. Le rouge correspond aux gaz brûlés et le bleu aux gaz frais. Gauche : temps t . Droite : temps $t + \Delta t$.

- la vitesse absolue, s_a , est déterminée en chaque point de cette nouvelle iso-surface grâce aux distances et normales précédemment stockées :

$$s_a = \left(\frac{d_t}{\Delta t} \right) \cdot \mathbf{n}_t ; \quad (5.13)$$

- la vitesse du fluide en chaque point de la nouvelle iso-surface est calculée le long de la normale :

$$u_2 = \mathbf{u}_2 \cdot \mathbf{n}_t ; \quad (5.14)$$

- la densité correspondant aux conditions de gaz frais, c'est-à-dire $C = 0$ et $S_C = 0$, est récupérée dans la table chimique pour chaque richesse locale. Celle-ci est notée ρ_{LUT} où l'indice LUT signifie encore une fois "Look Up Table" ;
- la vitesse de déplacement est déterminée à l'aide du ratio de densité locale (ρ_2/ρ_{LUT}), de la vitesse absolue et de la vitesse du fluide sur l'iso-surface 2 :

$$s_d = \frac{\rho_2}{\rho_{LUT}} (s_a - u_2) , \quad (5.15)$$

Cette vitesse de déplacement correspond à une vitesse de flamme laminaire étirée par analogie à une flamme $1D$;

- l'iso-surface 2 devient l'iso-surface 1 et l'algorithme est ré-initialisé.

L'intervalle de temps entre les deux iso-surfaces est imposé par l'utilisateur. Celui-ci doit être suffisamment grand pour que le front de flamme ne soit plus situé dans la même maille mais relativement court pour que la mesure soit locale. Un exemple d'estimation de cet intervalle de temps est donné dans la sous-section suivante.

5.4.3.2 Validation de la méthode

Une flamme en propagation libre à la richesse $\varphi = 0.95$ a été réalisée avec Cantera [34]. La vitesse laminaire ainsi obtenue est égale à $s_L = 37.53$ cm/s.

La méthode est testée sur une flamme de même richesse afin d'être validée. Le cas *C2* du chapitre 4 sert ici de référence.

Le maillage possède une discrétisation spatiale de $40\ \mu\text{m}$. La vitesse de flamme est connue grâce à Cantera. Il faut 0.1 ms à la flamme pour parcourir cette distance. Pour assurer une bonne mesure, un parcours minimal de deux mailles semble nécessaire. Par conséquent, l'intervalle de temps choisi entre les deux level-sets est de 0.25 ms.

Les points positionnés sur la level-set sont stockés dans un fichier ainsi que la vitesse laminaire calculée à cet endroit. Une fonction densité de probabilité est représentée sur la figure 5.14.

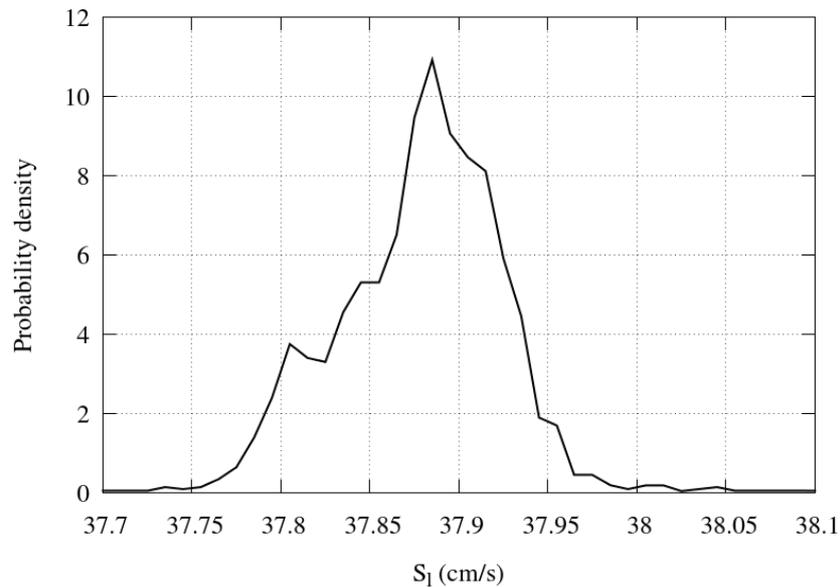


Fig 5.14 – Densité de probabilité de la vitesse laminaire pour le cas *C2* du chapitre 4.

Sur cette figure, deux choses sont à remarquer. Premièrement, la méthode donne des résultats précis en terme de mesure de vitesse. En effet, pour une richesse donnée, l'écart maximal de mesure est de 0.21 cm/s. En second lieu, une vitesse laminaire se distingue par un pic d'une valeur de 11% . La valeur trouvée est égale à 37.89 cm/s.

5.5 Analyse du mélange au moment de l'allumage

Les simulations dont les résultats sont présentés dans cette section ont été réalisées sur le maillage comportant 304 millions d'éléments. La partie injection est effectuée sur 2048 processeurs et dure 45 h 30.

5.5.1 Champs moyens

Afin de pouvoir réaliser des moyennes d'ensemble, six simulations ont été réalisées. Ce nombre de simulations a été limité par le coût CPU nécessaire à leur réalisation. Le but étant de se rapprocher au maximum des variations expérimentales, des spectres de turbulence ont été générés de

manière aléatoire. L'échelle intégrale ainsi que les fluctuations de vitesse sont gardées constantes pour les six simulations, seuls les nombres aléatoires générant les spectres sont modifiés.

Pour chaque simulation, les données sont collectées sur deux sections orthogonales. La première section correspond à la fenêtre de visualisation. La seconde possède les mêmes coordonnées axiales mais est située dans le plan XZ . Ces champs sont supposés non corrélés, ce qui implique que douze plans sont collectés. Des moyennes d'ensemble sont réalisées sur ces

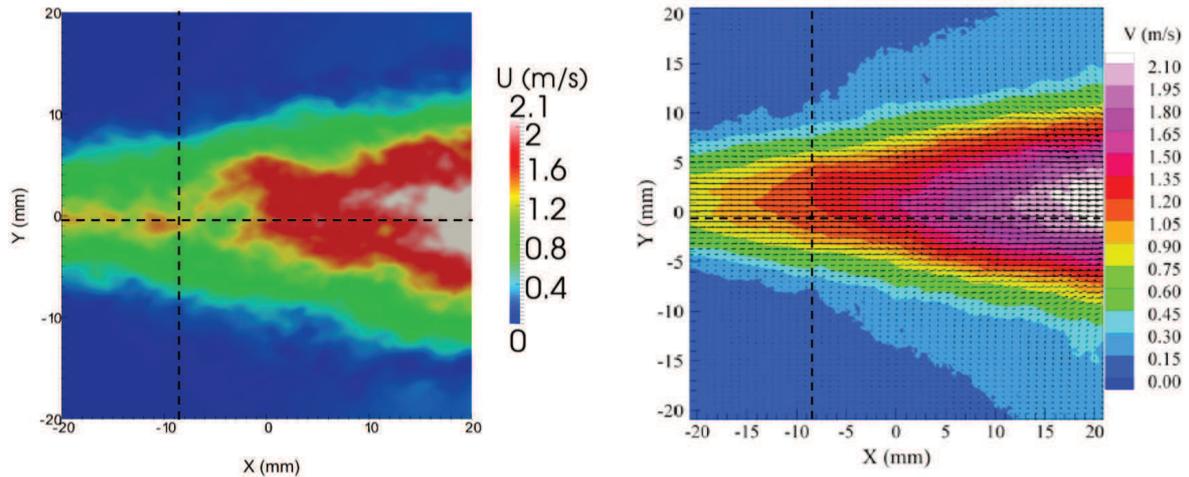


Fig 5.15 – Profil moyen du champ de vitesse juste avant l'allumage. Gauche : moyenne numérique : 12 plans issus de 6 simulations. Droite : moyenne expérimentale : 100 mesures.

douze plans et comparées aux résultats expérimentaux sur les figures 5.15 et 5.16.

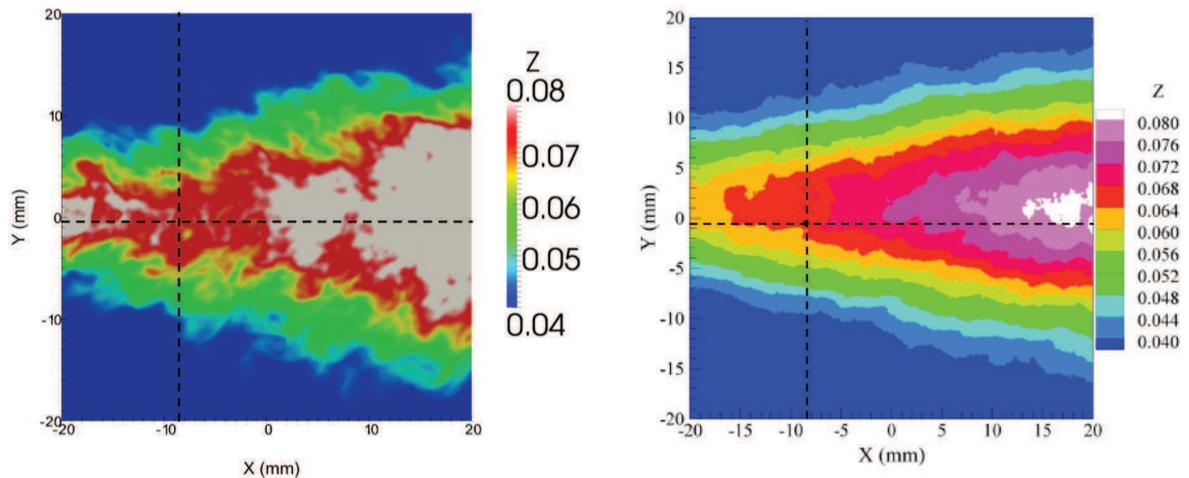


Fig 5.16 – Profil moyen de la fraction de mélange juste avant l'allumage. Gauche : moyenne numérique : 12 plans issus de 6 simulations. Droite : moyenne expérimentale : 100 mesures.

Les profils expérimentaux et numériques moyens des composantes u et v de la vitesse dans les directions transverse et longitudinale correspondant au point d'allumage sont représentés sur les figures 5.17 et 5.18.

Les profils numériques et expérimentaux sont similaires. La forme plus régulière des profils expérimentaux provient du fait que les moyennes sont réalisées sur 100 mesures, alors qu'uni-

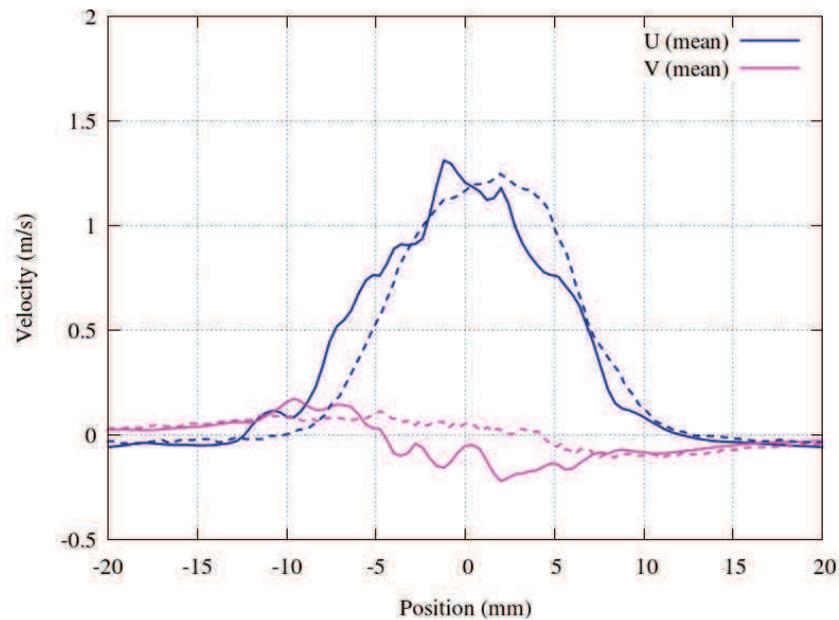


Fig 5.17 – Profil de la vitesse moyenne le long de la droite $X = -8.5$ mm. Ligne continue : profil numérique. Ligne pointillée : profil expérimental.

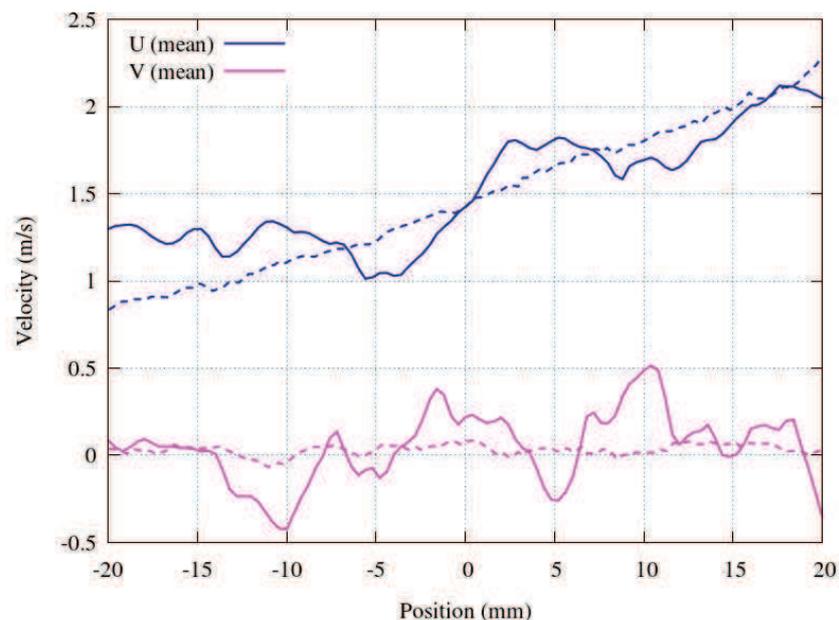


Fig 5.18 – Profil de la vitesse moyenne le long de la droite $Y = 0.5$ mm. Ligne continue : profil numérique. Ligne pointillée : profil expérimental.

quement 12 plans sont pris pour réaliser la moyenne numérique. La composante de vitesse u est largement supérieure à v . Sur la droite d'équation $X = -8.5$ mm, une forme de gaussienne est visible pour la composante de vitesse u . Le pic de cette gaussienne est aux alentours du point d'allumage et possède une vitesse d'environ $u = 1.3$ m/s. Sur la droite d'équation $Y = -0.5$ mm, la composante de vitesse u varie progressivement d'environ 1 m/s à 2.3 m/s. Quelle que soit la droite observée, la composante de vitesse v est très faible, toujours inférieure à 0.5 m/s.

Les profils de la richesse sont aussi tracés pour ces mêmes droites, figure 5.19.

La forme de gaussienne visible sur la figure 5.17 pour la composante de vitesse u se re-

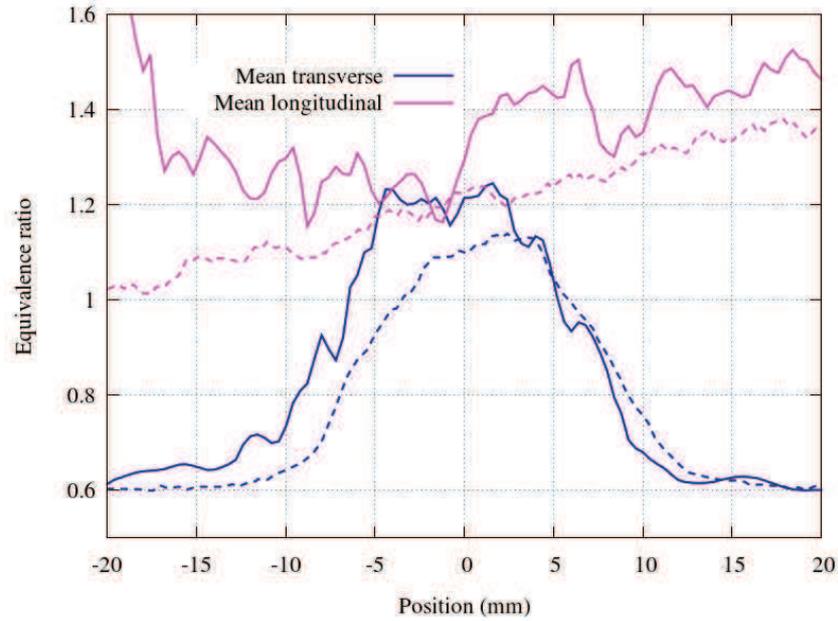


Fig 5.19 – Profil de la richesse moyenne le long des droites $X = -8.5$ mm et $Y = 0.5$ mm. Ligne continue : profil numérique. Ligne pointillée : profil expérimental.

trouve sur le profil de richesse le long de la droite $X = -8.5$ mm. Une différence entre le profil expérimental et le profil numérique le long de la droite $Y = -0.5$ mm est visible. Le mélange est plus riche en numérique qu'en expérimental au niveau de l'injecteur.

Au niveau du point d'allumage, c'est-à-dire au point de coordonnées $x_{ign} = -8.5$ mm et $y_{ign} = -0.5$ mm relativement au centre de la fenêtre de visualisation, la valeur de la vitesse moyenne est de 1.26 m/s et la richesse vaut $\varphi = 1.19$. Les valeurs obtenues sont bien en accord avec celles observées dans l'expérience, soit pour rappel une vitesse de 1.134 m/s et une richesse de $\varphi = 1.074$.

Une des principales difficultés numériques consiste à bien capter l'ouverture du jet afin d'obtenir une stratification correcte et donc une propagation de flamme comparable à l'expérience pendant la seconde phase de la simulation. Les figures 5.15 et 5.16 montrent que cette caractéristique est respectée. En effet, l'angle d'ouverture est ici défini comme étant l'angle formé par l'axe X et l'iso-richesse $\varphi = 0.8$. Cet angle mesure environ 10° sur les champs moyens expérimentaux et 12° sur les champs moyens numériques.

5.5.2 Champs instantanés

Jusqu'à présent, les champs moyens ont été comparés. Cependant, les champs instantanés sont également importants pour examiner la dynamique de l'écoulement réactif. Ceux-ci sont représentés pour un cas sur les figures 5.20 et 5.21.

Tout comme sur les champs moyens, l'expansion de la vitesse et de la fraction de mélange dans les directions transverses sont symétriques par rapport à l'axe du jet. La distribution spatiale des structures du fluide est proche des résultats expérimentaux. Des corrélations entre le champ de vitesse et le champ de fraction de mélange sont visibles.

5.5.3 Structures turbulentes

La topologie d'un mélange complexe turbulent peut être mise en évidence grâce au contour du critère Q . Celui-ci détecte en effet les structures cohérentes du fluide [83]. Le critère Q est le

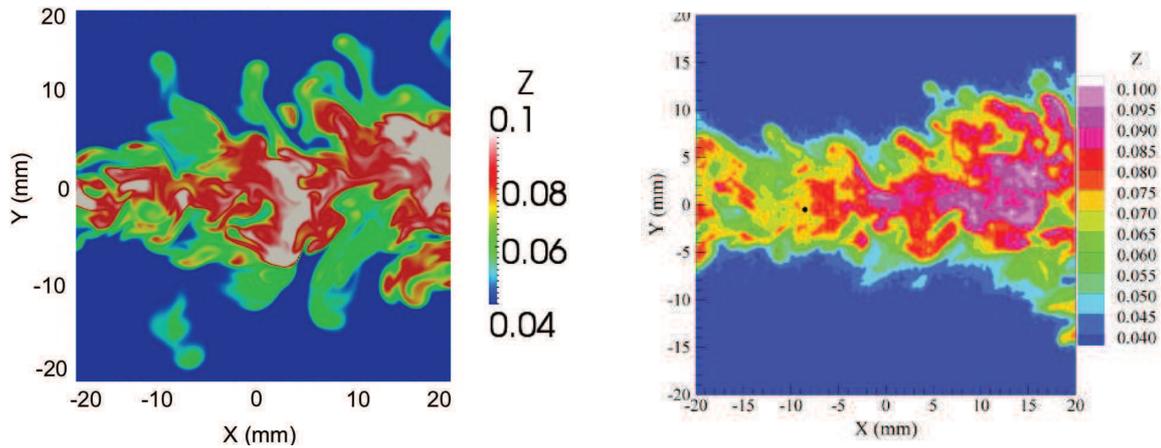


Fig 5.20 – Champ instantané de fraction de mélange au moment de l'allumage. Gauche : LES. Droite : expérimental.

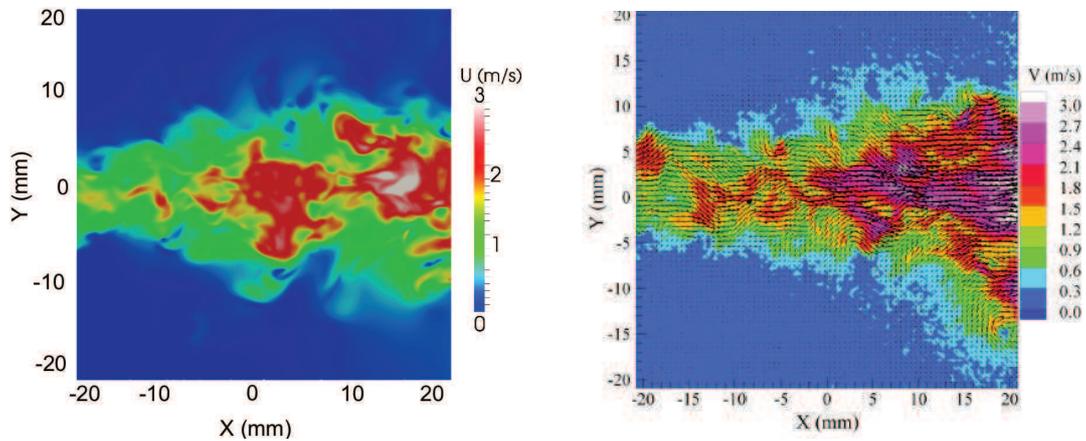


Fig 5.21 – Champ instantané de vitesse au moment de l'allumage. Gauche : LES. Droite : expérimental.

second invariant du tenseur des déformations. Il est donné par :

$$Q = \frac{1}{2} (\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij}) , \quad (5.16)$$

avec $\Omega_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} - u_{ji})$ et $S_{ij} = \frac{1}{2}(u_{ij} + u_{ji})$.

L'intérieur d'une structure tourbillonnaire est défini pour $Q > 0$. Une iso-surface instantanée du critère Q colorisée par la vitesse est représentée sur la figure 5.22. Celle-ci souligne bien l'instationnarité du jet et sa turbulence.

Sur cette figure, un premier tourbillon de forme toroïdale se forme près de l'entrée ainsi qu'une partie d'un second. Ensuite, les structures deviennent irrégulières, les tourbillons toroïdaux sont cassés et évoluent en filaments qui s'étendent rapidement dans les directions transverses. Le maillage du côté droit de la boîte est plus grossier ce qui explique que les structures sont moins bien captées dans cette région (cf. section 5.2.3).

La vitesse devient de plus en plus rapide en s'éloignant de l'entrée. En effet, lorsque l'allumage prend place, l'injection a déjà été stoppée depuis 17 ms. Par conséquent, la vitesse du jet est très faible près de l'injecteur et plus forte du côté droit du domaine.

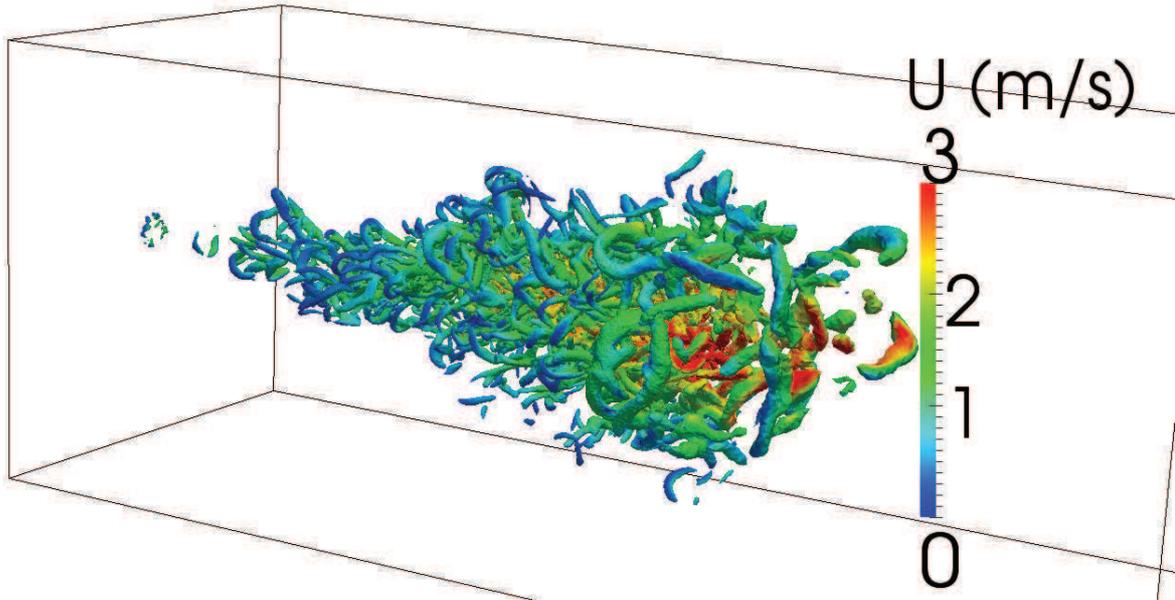


Fig 5.22 – Iso-surface du critère $Q = 2.10^5 s^{-2}$ coloriée par la norme de la vitesse juste avant l'allumage, à $t = 52$ ms.

5.6 Propagation de la flamme

Afin de pouvoir étudier la propagation de la flamme sans subir de manière notable l'influence des parois, la propagation du noyau est observée durant 5 ms. La phase de combustion est réalisée pour les six simulations du cas stratifié. Les simulations sont réalisées sur 4096 processeurs et durent 23 h pour simuler 5 ms physique. Pour clarifier les résultats, le temps initial est remis à $t = 0$ ms au moment de l'allumage.

La mesure de vitesse présentée section 5.4.3 est directement effectuée au cours de la simulation. Les résultats sont enregistrés à chaque milli-seconde. Ces paramètres expliquent la durée de la simulation, bien plus longue que pour la phase d'injection (pour rappel 45h30 sur 2048 processeurs).

5.6.1 Effets de la stratification

Dans le chapitre précédent, la flamme était influencée uniquement par l'étirement et la stratification en richesse. Dans cette section, la turbulence et la topologie du jet sont deux nouveaux paramètres. L'intérêt de la présente section est d'essayer de déterminer l'influence de la stratification par rapport aux effets de la turbulence.

Pour cela, deux calculs homogènes sont réalisés, un à la richesse $\varphi = 0.8$ et l'autre à la stoechiométrie, $\varphi = 1.0$. Contrairement aux cas stratifiés, les gaz initialement présents dans la chambre de combustion et ceux qui y sont injectés présentent la même richesse. Les paramètres de la turbulence choisis pour les cas stratifiés sont maintenus pour les cas homogènes.

Dans un premier temps, la forme de la flamme est analysée grâce au coefficient d'asymétrie présenté dans la section 4.5.3. Pour rappel, ce coefficient correspond au rapport de la plus grande distance entre deux points situés sur l'axe X , L_x , sur la plus grande distance entre deux points situés sur l'axe Y , L_y . L'évolution temporelle de ce coefficient est représentée sur la figure 5.23. Le cas stratifié est comparé aux deux cas homogènes, au cas expérimental ainsi qu'à une forme fictive qui correspond à l'élongation de la flamme homogène stoechiométrique sur l'élongation de la flamme homogène pauvre. Cette courbe fictive donne une approximation du rapport maximal

que la flamme stratifiée pourrait atteindre.

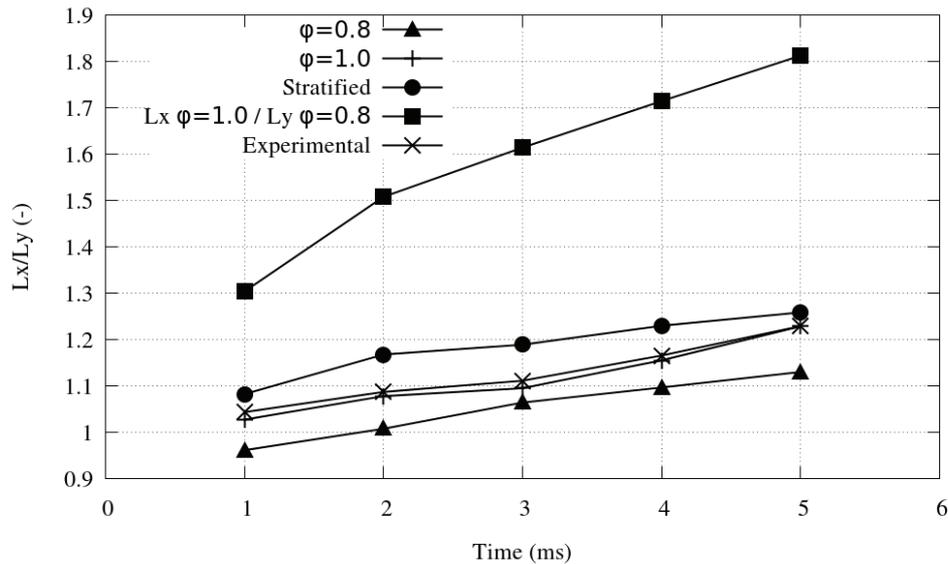


Fig 5.23 – Coefficient d’asymétrie en fonction du temps pour les différents cas.

Pour les flammes homogènes, le coefficient d’asymétrie est égal à 1 si la flamme se propage librement dans un domaine au repos. Dans le cas actuel, la vitesse du jet ainsi que la turbulence introduite dans le domaine entraînent un écart sur cette valeur. Cet écart permet de différencier l’effet de la stratification des autres paramètres.

Sur la figure 5.23, les coefficients d’asymétrie des deux cas homogènes augmentent avec le temps. La différence de vitesse entre la direction axiale et les directions transverses est la cause de cette augmentation. Le jet ayant été stoppé avant la fermeture de la boîte, les vitesses les plus fortes sont situées du côté droit du domaine. Plus le noyau de flamme évolue, plus le mélange qu’il rencontre sur le côté droit est rapide. La vitesse du côté gauche demeure quasiment inchangée au cours du temps. En outre, la forme de la boîte privilégie naturellement la propagation dans la direction axiale.

A chaque instant, le coefficient du cas stratifié est plus grand que ceux des cas homogènes. L’explication peut être vue de la manière suivante : après quelques milli-secondes, des poches de mélange riche sont toujours présentes le long de l’axe longitudinal. Au même instant, le noyau de flamme rencontre des mélanges de plus en plus pauvres dans les directions transverses. Ainsi, la vitesse de déplacement est plus faible dans la direction transverse que dans la direction longitudinale.

Le coefficient du cas stratifié simulé demeure dans l’intervalle $[r_{exp} - \delta_r; r_{exp} + \delta_r]$ avec r_{exp} la valeur moyenne du coefficient obtenu à partir des données expérimentales et δ_r son écart type. Une centaine de tirs expérimentaux a été réalisée pour calculer la valeur moyenne r_{exp} du coefficient expérimental. Les écarts types obtenus expérimentalement sont donnés dans le tableau 5.4.

Temps (ms)	1	2	3	4	5
$\delta_r \times 10^2$	8.31	9.47	9.90	9.15	10.32

Tableau 5.4 – Valeurs des écarts types expérimentaux.

Les valeurs du coefficient d’asymétrie du cas stratifié sont notablement inférieures à celles du coefficient fictif, qui est nettement plus élevé que tous les autres. Dans le chapitre précédent, un

mouvement au sein des gaz brûlés a été mis en évidence. Il a été montré que ce mouvement était responsable d'une plus faible déformation qu'attendue. Cela semble aussi se révéler vrai dans le cas présent turbulent. Cependant, il est difficile de différencier les fluctuations de vitesse des gaz frais, les effets de l'étirement de la dynamique présente dans les gaz brûlés, comme montré sur la figure 5.24.

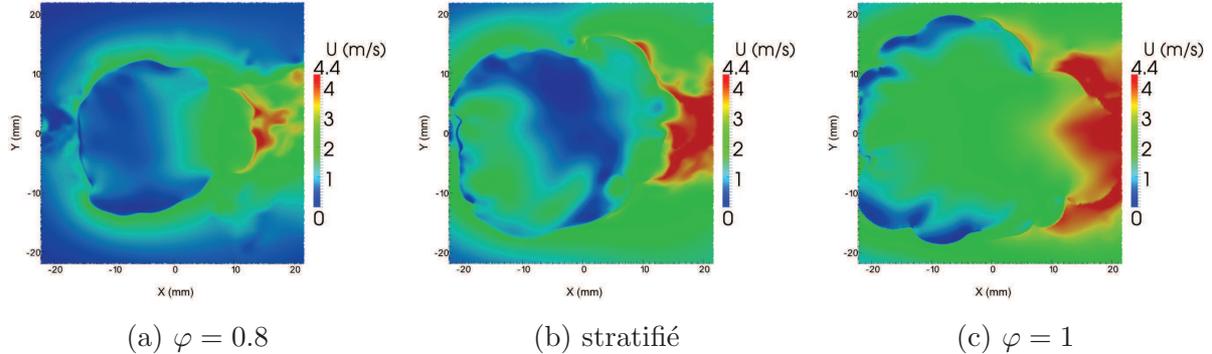


Fig 5.24 – Champs instantanés de vitesse à $t = 5$ ms. Impossibilité de différencier le mouvement dû à la vitesse initiale de celui impliqué par la stratification.

Sur la figure 5.25, des champs instantanés de vitesse d'un cas stratifié sont comparés à ceux des cas homogènes à différents instants. Sur ceux-ci, les gaz brûlés sont masqués. En effet, dans l'expérience, il est impossible de voir ce qu'il se passe dans les gaz brûlés. Le bleu foncé ne correspond donc pas à une richesse $\varphi < 0.6$ mais au noyau de gaz brûlés.

La similarité des formes et dimensions des flammes à $t = 1$ ms semble être due à l'initialisation du noyau. Ces figures confirment que le comportement de la flamme stratifiée est compris entre ces deux richesses. La flamme pauvre de richesse $\varphi = 0.8$ se propage bien plus lentement. Pour cette richesse, la vitesse du fluide est faible comparée aux autres cas. Au contraire, pour la flamme stœchiométrique, soit $\varphi = 1.0$, la flamme se propage tellement vite qu'il n'est pas possible d'accéder à son intégralité dans la fenêtre de visualisation.

La richesse semble avoir une influence sur la vitesse du jet. En effet, plus le mélange est riche, plus le fluide situé à droite de la flamme est rapide. De même sur le côté gauche, même si cela est moins remarquable à cause de la vitesse opposée du jet à l'instant d'allumage. Dans tous les cas, les flammes commencent à s'allonger dans la direction axiale à partir de $t = 2$ ms.

5.6.2 Champs instantanés

L'évolution temporelle des champs de vitesse et de richesse pour une des simulations est visible sur les figures 5.26 et 5.27. Il faut préciser qu'il s'agit de sections $2D$ d'un front de flamme $3D$.

Tout comme dans l'expérience, les déformations locales de la flamme s'amplifient avec le temps. Ces plissements sont dus à la turbulence, aux fluctuations de richesse rencontrées par le front de flamme ainsi qu'aux instabilités intrinsèques de la flamme.

Une comparaison des champs de richesse numérique et expérimental à $t = 5$ ms est donnée sur la figure 5.28. L'aspect général des champs numérique et expérimental est globalement équivalent en terme de déformations locales et de taille de cellules. La simulation numérique a tendance à surestimer la vitesse du fluide. En effet, dans la fenêtre de visualisation, la vitesse maximale obtenue numériquement est de 5.75 m/s alors qu'elle n'est que de 4.4 m/s dans le cas expérimental. Les champs observés sont instantanés, ce qui pourrait expliquer ces valeurs, mais la tendance semble se confirmer sur l'ensemble des six simulations.

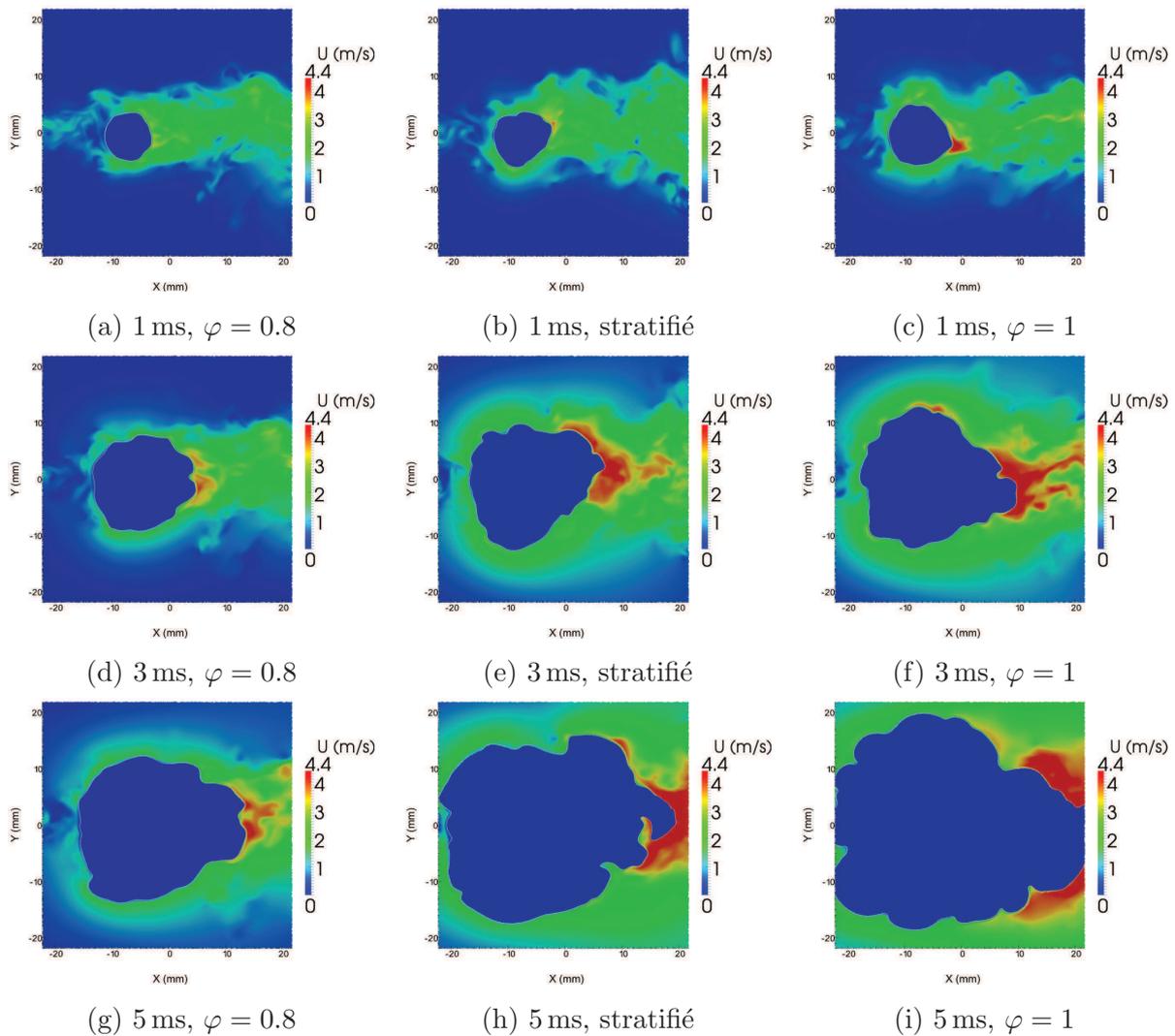


Fig 5.25 – Champs instantanés de combustion homogène et stratifiée.

Il est aussi intéressant de remarquer que dans les deux cas, une poche de mélange riche est présente au dessus de la flamme, sur le côté droit. La simulation numérique semble ainsi bien prendre en compte la topologie du jet et de la stratification.

5.6.3 Contours moyens

La flamme sphérique attendue après une milli-seconde n'est pas totalement observable sur les champs instantanés. C'est pourquoi, tout comme dans la partie injection, les six simulations avec des spectres turbulents différents sont réalisées. Ainsi, il est aussi possible d'obtenir des estimations des moyennes d'ensemble dans cette section. La figure 5.29 montre les contours moyens de la flamme obtenus à chaque milli-seconde.

Les contours moyens permettent d'apporter des précisions sur les constatations visibles sur les champs instantanés. Nous voyons ici que les résultats attendus sont vérifiés. En effet, le contour de flamme est bien sphérique après 1 ms puis il tend à se propager dans la direction axiale. Pour rappel, cette direction est privilégiée pour trois raisons. Tout d'abord, il s'agit de la direction où le mélange le plus riche est présent. Pour les valeurs de richesses considérées, il s'agit du lieu où la flamme est censée être la plus rapide et partant, se propager le plus rapidement. La seconde raison est la vitesse initiale du jet. En effet, le flux du jet a été coupé depuis plusieurs

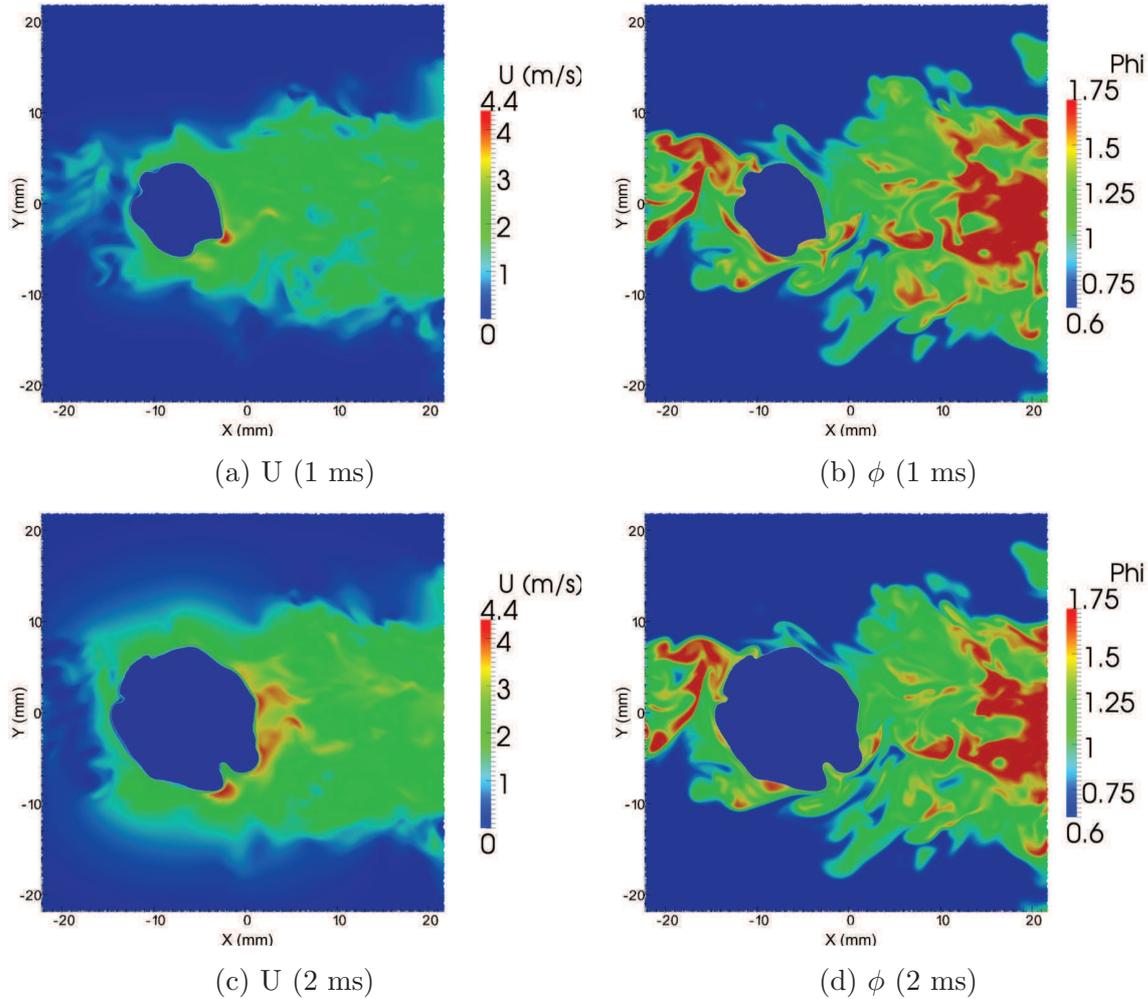


Fig 5.26 – Champs instantanés de vitesse et de richesse d'une combustion stratifiée turbulente.

milli-secondes, mais le fluide n'est pas pour autant au repos dans la boîte. Par conséquent, la flamme a tendance à suivre la trajectoire du jet. La dernière raison est la forme de la boîte. Les parois sont plus proches dans les directions transverses, la flamme prend donc naturellement la direction axiale.

La flamme se développe dans un mélange instationnaire. De ce fait, l'évolution de certaines variables sur son contour est examinée, figure 5.30.

Comme attendu, la flamme passe d'un mélange riche à un mélange pauvre. La présence du mélange riche après 5 ms est toujours visible sur l'axe X . La vitesse absolue et la vitesse du fluide sont très fortement corrélées. Cette caractéristique est surtout visible sur l'axe X . Du côté gauche de la flamme, le jet impacte directement le front et empêche celui-ci de se propager. Au contraire, du côté droit, la flamme et le jet se propagent dans la même direction, ce qui implique à la fois une plus grande vitesse absolue et une plus grande vitesse du fluide.

5.6.4 Contour 3D

Le dispositif expérimental ne permet pas la réalisation de champs 3D. Cette contrainte n'a pas lieu d'être avec la simulation numérique. Une iso-surface de la variable de progrès colorisée par la richesse à $t = 5$ ms est représentée sur la figure 5.31.

Ce contour permet de voir que le mélange riche est uniquement présent sur l'axe X . La

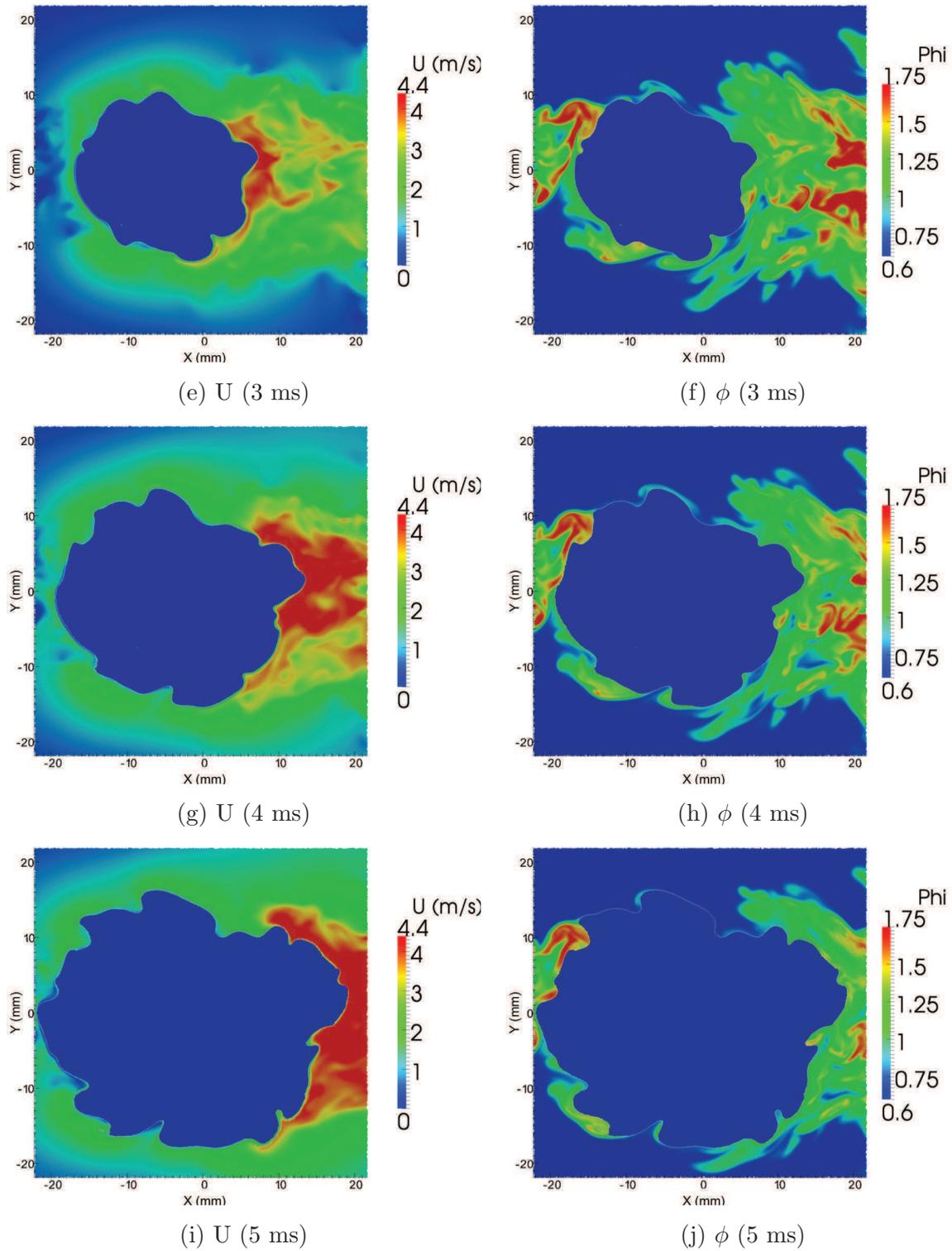


Fig 5.27 – Champs instantanés de vitesse et de richesse d’une combustion stratifiée turbulente, suite de la figure 5.26.

richesse du mélange est plus pauvre sur les directions transverses. A ce propos, on peut noter que la richesse minimale de la boîte, $\varphi = 0.6$, est atteinte. Cette différence de richesse associée à la vitesse du jet explique la forme d’œuf de la flamme.

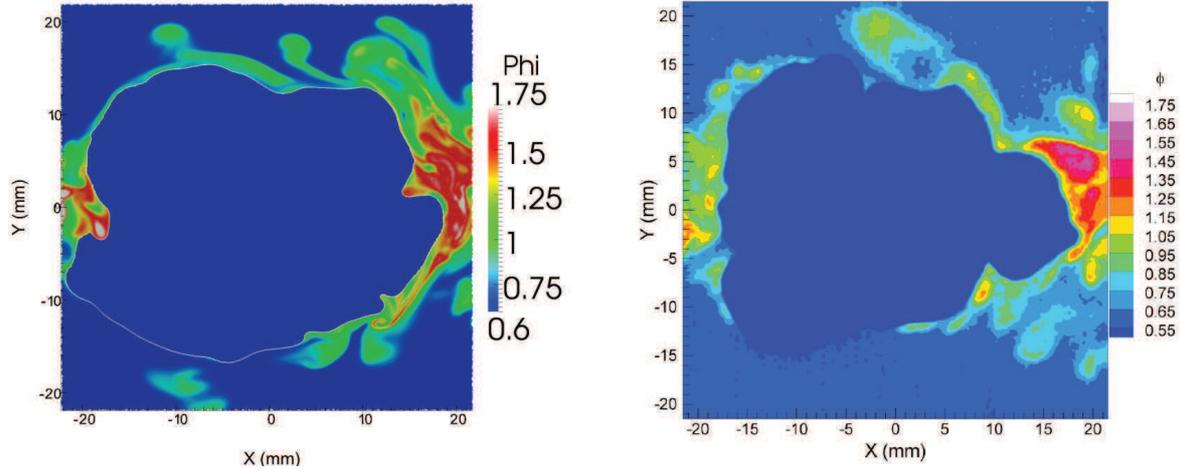


Fig 5.28 – Champs instantanés de richesse à $t = 5$ ms. Gauche : numérique. Droite : expérimental.

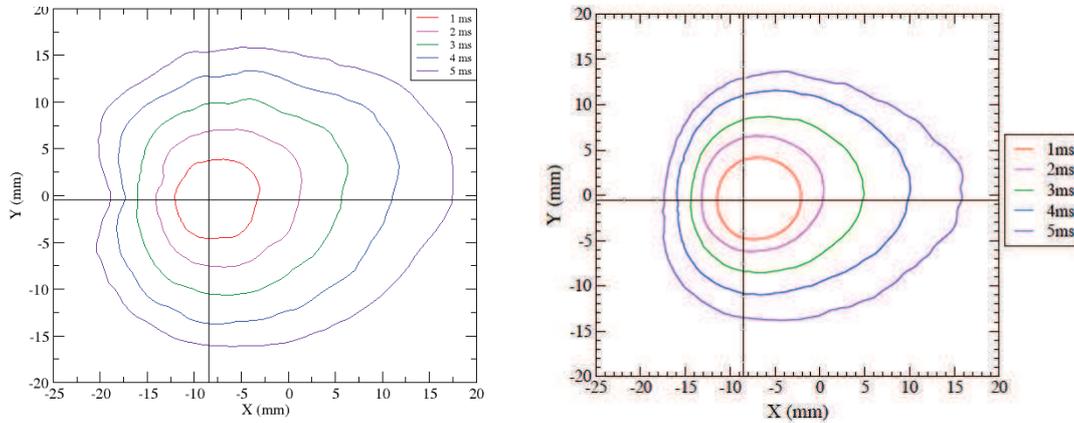


Fig 5.29 – Contours moyens de la flamme. Gauche : numérique (six simulations). Droite : expérimental (100 réalisations).

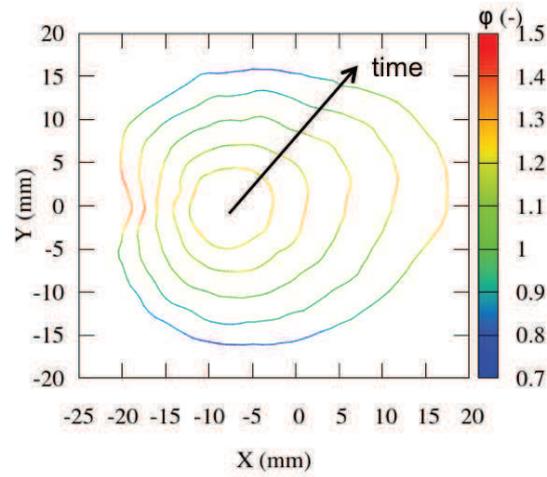
5.6.5 Analyse de la vitesse de flamme

La méthode de mesure de vitesse par levet-set présentée dans la sous-section 5.4.3 a été appliquée aux six simulations.

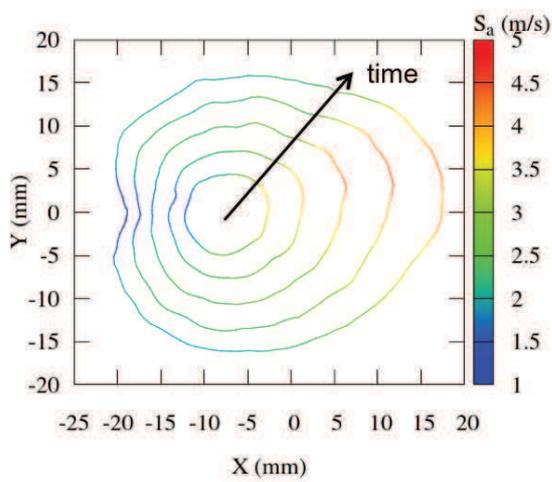
Un diagramme de dispersion représentant la vitesse laminaire en fonction de la richesse est donné sur la figure 5.32. Sur cette figure, la ligne noire représente la vitesse de flamme laminaire non étirée donnée par des précédents calculs avec Cantera [34]. Pour le post-traitement numérique, la gamme de richesse est discrétisée de $\varphi = 0.6$ à $\varphi = 3.0$ par pas de 0.048. La vitesse laminaire est moyennée pour chaque pas de richesse.

De manière générale, les points sont en accord avec la vitesse de flamme laminaire trouvée avec Cantera. Il est toutefois à remarque que pour $1.0 < \varphi < 1.3$, les valeurs sont légèrement sous-estimées. Le diagramme de dispersion rend compte que la chimie tabulée permet de prédire une vitesse de flamme correcte.

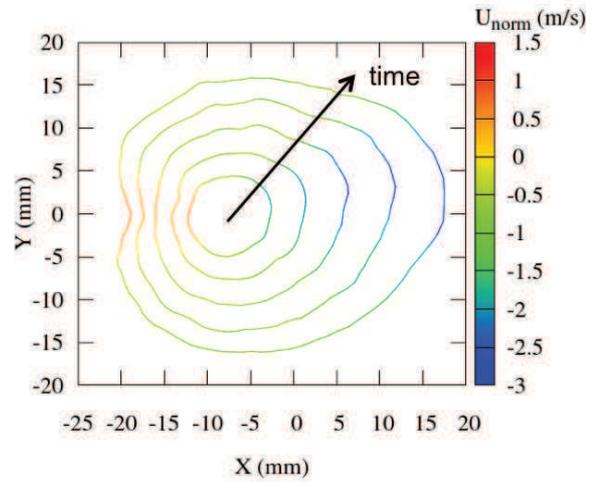
Cela se voit d'autant plus en examinant les diagrammes de dispersion de toutes les vitesses laminaires contenues dans le plan XY à chaque milli-seconde, figure 5.33. Tout comme sur le diagramme de dispersion moyenné, les vitesses sont cohérentes avec celles prédites par Cantera.



(a) Richesse



(b) Vitesse absolue



(c) Vitesse du fluide

Fig 5.30 – Evolution temporelle du contour moyen dans la fenêtre de visualisation, colorié respectivement par la richesse (a), la vitesse absolue (b) et la vitesse du fluide le long de la normale (c).

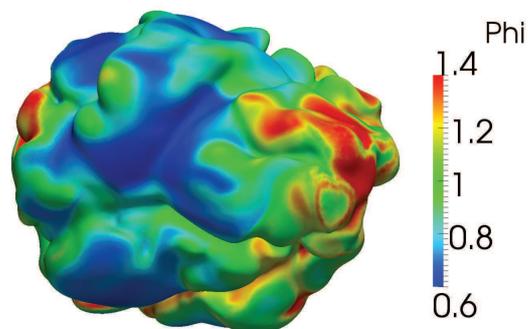


Fig 5.31 – Simulation 3D : iso-surface du contour de flamme, à $t = 5$ ms, coloriée par la richesse.

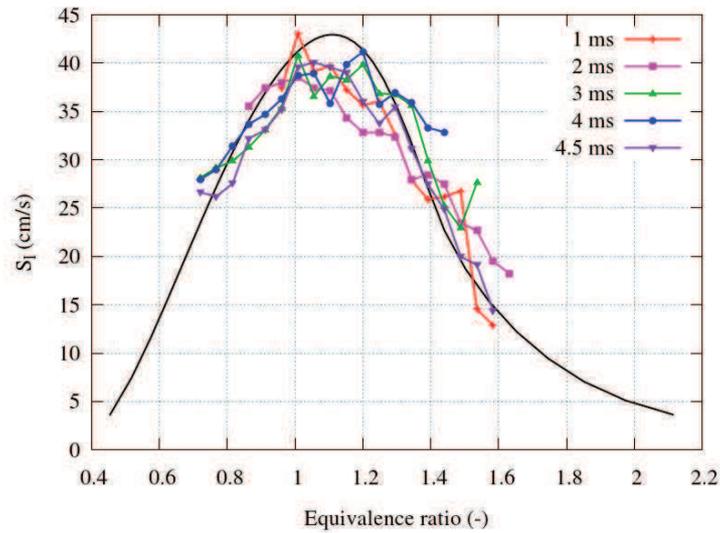


Fig 5.32 – Diagramme de dispersion de la vitesse laminaire moyennée en fonction de la richesse pour différentes milli-secondes.

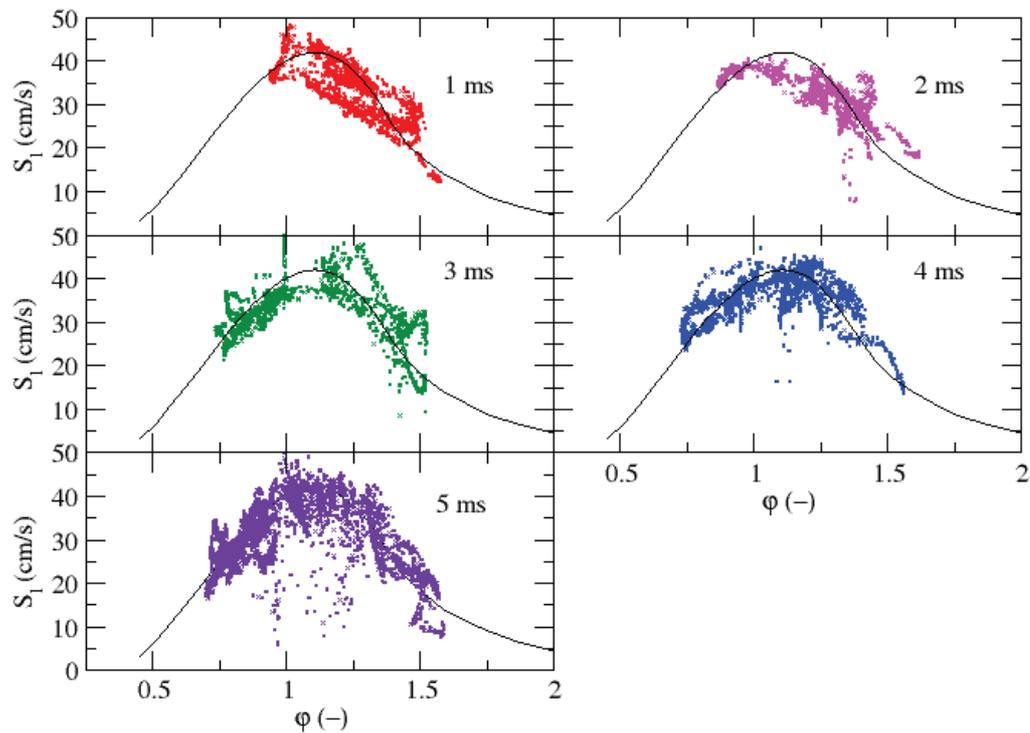


Fig 5.33 – Diagramme de dispersion de la vitesse laminaire en fonction de la richesse, tracé à chaque milli-seconde.

Ce graphique fournit en outre une information sur les richesses rencontrées. Les richesses les plus faibles ne sont pas présentes durant les deux premières milli-secondes.

5.6.6 Influence de la courbure

Sur la figure 5.32, l'étirement n'est pas pris en compte dans le calcul des vitesses de flamme laminaire par la méthode de level-set. Par contre, la courbe noire résultante de Cantera représente les vitesses de flamme laminaire non étirée. L'expression de l'étirement est donnée dans l'équa-

tion (4.17). Ici, seul le terme de droite de cette équation, lié à la courbure, est analysé. L'étirement tangentiel n'est pas considéré. Le but est donc de déterminer l'influence de la courbure sur la vitesse de flamme.

Le contour de flamme est déterminé grâce à l'iso-surface de la variable de progrès $C = 0.73$. Un tel contour extrait sous Paraview [2] est représenté sur la figure 5.34 à $t = 5$ ms.

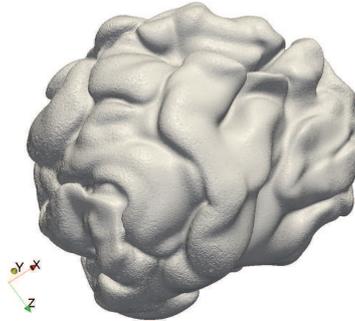


Fig 5.34 – Extraction du contour de flamme défini par l'iso-contour de la variable de progrès $C = 0.73$.

Ce contour présente une surface rugueuse. Le maillage comporte en effet un nombre important de points et l'iso-contour est créé à partir d'une interpolation de la variable sur ceux-ci. Une analyse directe sur un tel contour se révèle inadéquate. Le contour doit premièrement être traité pour ensuite être examiné de façon pertinente.

Des filtres sont appliqués à ce contour. Tout d'abord le contour est régularisé puis les normales à la surface de flamme sont générées. Une surface plus régulière est ainsi obtenue, figure 5.35.

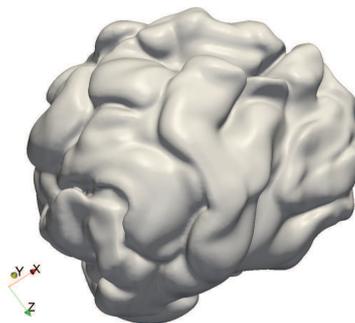


Fig 5.35 – Lissage du contour de flamme grâce à l'application de plusieurs filtres.

L'opérateur de courbure moyenne peut être calculé selon,

$$H = \frac{1}{2}(h_1 + h_2), \quad (5.17)$$

où h_1 et h_2 correspondent aux inverses des rayons de courbure principaux. La figure 5.36 représente un aperçu du résultat appliqué à la figure 5.35.

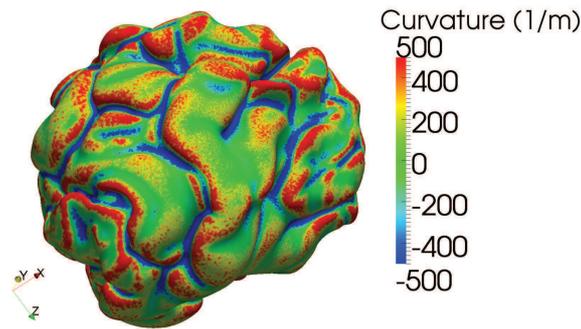


Fig 5.36 – Champ de courbure sur le contour de flamme.

Le but de cette section est de montrer l'influence de la courbure sur la vitesse de flamme laminaire. Jusqu'à présent, nous avons réussi à calculer la courbure sur le contour de flamme. Cependant, le noyau évoluant dans un mélange stratifié, la richesse au niveau du contour de flamme n'est pas unique, comme nous l'avons déjà vu sur la figure 5.31. Si l'on examine le contour de flamme coloré par la richesse, visible figure 5.37, le fait que la richesse n'est pas corrélée avec la courbure devient clair.

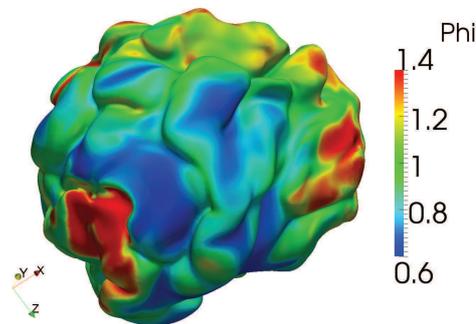


Fig 5.37 – Champ de richesse reconstruit sur le contour de flamme.

La gamme de richesse présente sur le front de flamme est très large. Par conséquent, pour étudier l'influence de la courbure, il devient nécessaire de regarder uniquement une petite gamme de richesse. La flamme passe d'un milieu relativement riche à un milieu relativement pauvre. Par conséquent, les richesses présentes sur le contour de flamme évoluent temporellement dans ce sens. Des diagrammes de dispersion traçant la vitesse de flamme laminaire en fonction de l'étirement à chaque milli-seconde, pour une petite bande de richesse, sont présentés sur la figure 5.38.

L'amplitude de la bande est prise égale pour chaque milli-seconde et possède un delta de 0.02. Le tableau 5.5 contient les valeurs des vitesses de flammes laminaires non étirées obtenues par Cantera.

Les résultats présentés sur les diagrammes de dispersion, figure 5.38, sont en accord avec ces valeurs à chaque instant. La tendance des différentes courbes est similaire. Plus la courbure est

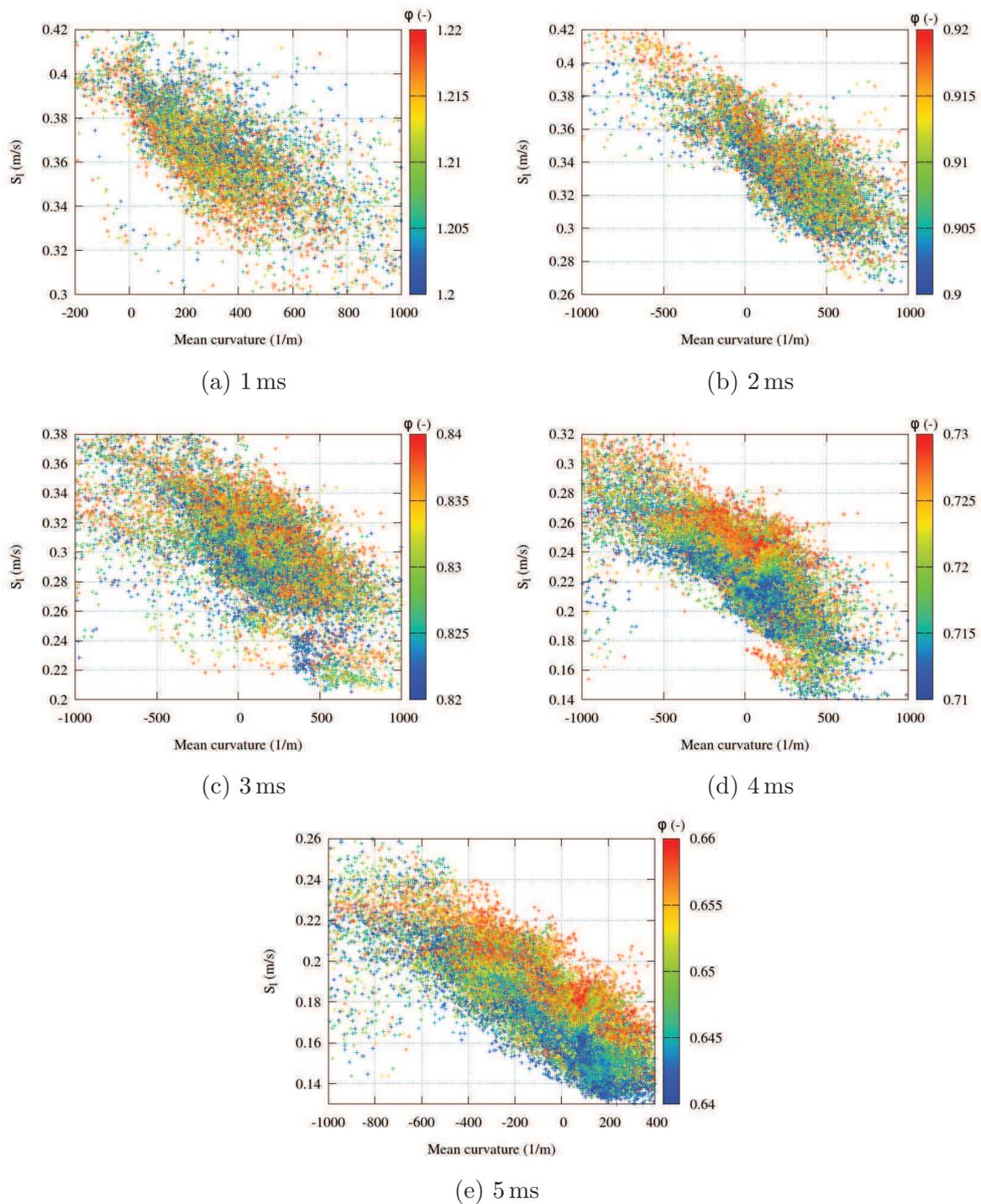


Fig 5.38 – Diagramme de dispersion de la vitesse laminaire en fonction de la courbure à différents instants pour des petites bandes de richesse. Les bandes de richesse diffèrent selon le temps du fait de l'évolution de la flamme dans le mélange stratifié.

positive, plus la vitesse de flamme laminaire diminue. Au contraire, pour une courbure négative, elle a tendance à augmenter.

Sur les graphes (d) et (e), la différence en fonction de la richesse est clairement visible. Les vitesses les plus faibles à un étirement donné correspondent aux richesses les plus faibles. La tendance est un peu moins visible sur les autres graphes.

Pour vérifier cette tendance, le diagramme de dispersion à $t = 5$ ms est retravaillé. La bande

	1 ms		2 ms		3 ms		4 ms		5 ms	
	min	max	min	max	min	max	min	max	min	max
φ	1.2	1.22	0.9	0.92	0.82	0.84	0.71	0.73	0.64	0.66
$s_{l,0}(\varphi)$ (cm/s)	40.37	39.54	35.45	36.55	30.37	31.70	22.00	23.06	16.4	18.0

Tableau 5.5 – Vitesses de flamme laminaire non étirée données par Cantera pour les richesses minimales et maximales étudiées.

de richesse étudiée est divisée en quatre bandes afin d'obtenir une vitesse laminaire moyenne par bande. Le nouveau scatter-plot ainsi obtenu est tracé sur la figure 5.39.

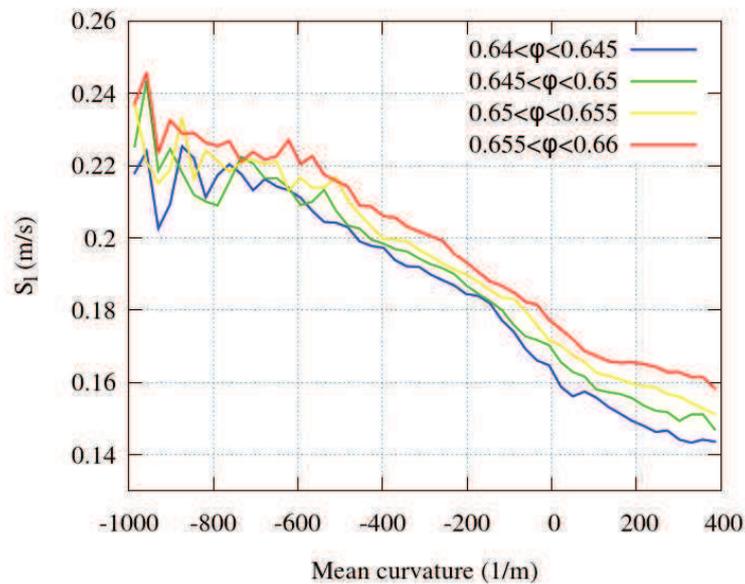


Fig 5.39 – Courbes de la vitesse laminaire en fonction de la courbure pour des richesses comprises entre 0.64 et 0.66 à $t = 5$ ms.

La courbe correspondant au mélange le plus pauvre est bien située au dessous des autres. L'accord avec les valeurs pour une courbure nulle est d'autant plus vraie sur ce graphe.

Une symétrie de la dépendance entre courbure positive et courbure négative est visible. La contribution de la courbure à la vitesse de flamme laminaire s'annule donc en moyenne, ce qui explique les bons accords entre vitesse laminaire moyennée et vitesse laminaire non étirée sur la figure 5.32.

5.6.7 Dynamique dans les gaz brûlés

Dans la section 4.5.7, un mouvement au sein des gaz brûlés a été détecté et analysé. Lors d'une combustion dans un milieu stratifié en richesse, la vitesse absolue est modifiée sur l'ensemble du front de flamme. Une dynamique semble apparaître dans les gaz brûlés.

Sur une coupe d'un champ de vitesse, où les gaz brûlés ne sont pas cachés, figure 5.40, aucun mouvement propre ne se distingue.

Le champ initial de vitesse du fluide ne peut pas être soustrait car il est modifié temporellement par le mouvement de la flamme. Une étude directe de la dynamique présente dans les gaz

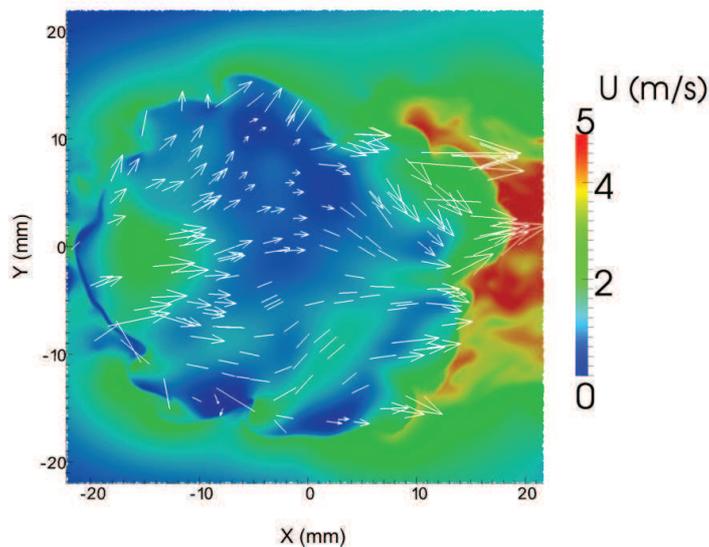


Fig 5.40 – Champ de vitesse dans la fenêtre de visualisation, les gaz brûlés ne sont plus cachés.

brûlés est difficile.

La flamme est analysée au temps $t = 4$ ms à l'aide du modèle présenté dans la section 4.5.7. L'hypothèse forte de stationnarité à la base du modèle n'est pas valable dans le cas présent. En effet, la flamme est encore dans ses premiers instants de développement et le milieu dans lequel elle se développe est complètement instationnaire. Cependant, nous avons vu dans la section 5.6.1 que l'asymétrie de la flamme semblait moins importante que celle prédite par le coefficient fictif. Le but est de voir si les équations constituant le modèle peuvent tout de même être généralisées à des cas moins académiques.

La seconde hypothèse du modèle consiste à supposer que le domaine est divisé en deux parties, une "riche" (proche de la stœchiométrie) et une pauvre. Pour chaque partie, une seule valeur de variable est supposée présente. Dans le cas 3D turbulent, la flamme rencontre à un même instant des mélanges de richesses différentes. A $t = 4$ ms, la gamme de richesse présente au niveau du front de flamme est $0.6 \leq \varphi \leq 1.7$. Par conséquent, les notions de côté riche et de côté pauvre présentes dans le modèle ne sont plus cohérentes ici. Les notations f pour rapide (fast) et s pour lent (slow) sont adoptées. Les flammes les plus rapides se situent autour de la stœchiométrie tandis que les flammes les plus lentes sont au niveau des mélanges pauvres ou très riches. Le modèle tel qu'il a été présenté dans la section 4.5.7 ne peut pas être directement appliqué.

La première équation du modèle concerne le saut d'impulsion à travers la flamme (cf. équation (4.31)),

$$S_s([\rho]s_a^2)_s = S_f([\rho]s_a^2)_f. \quad (5.18)$$

Les hypothèses du modèle (stationnarité et domaine divisé en deux parties avec valeur de variable égale tout le long de la partie) n'étant plus valables ici, il est primordial d'examiner les membres de l'équation de manière indépendante, sans en assurer l'égalité. Dans un premier temps, le terme $[\rho]s_a^2$ est analysé.

La gamme de richesse présente sur le contour de flamme est très étendue. Celle-ci est divisée en plusieurs bandes de $\Delta\varphi = 0.1$, de $0.6 \leq \varphi < 0.7$ à $1.6 \leq \varphi < 1.7$. Les valeurs trouvées sont comparées aux valeurs théoriques calculées sous l'hypothèse de flamme 1D laminaire en propagation libre. Les valeurs théoriques (indice *th*) sont calculées pour la valeur centrale de

chaque bande selon

$$([\rho]s_a^2)_{th} = [\rho] \left(\frac{\rho_{FG} s_L}{\rho_{BG}} \right)^2. \quad (5.19)$$

Les résultats obtenus sont représentés sur la figure 5.41.

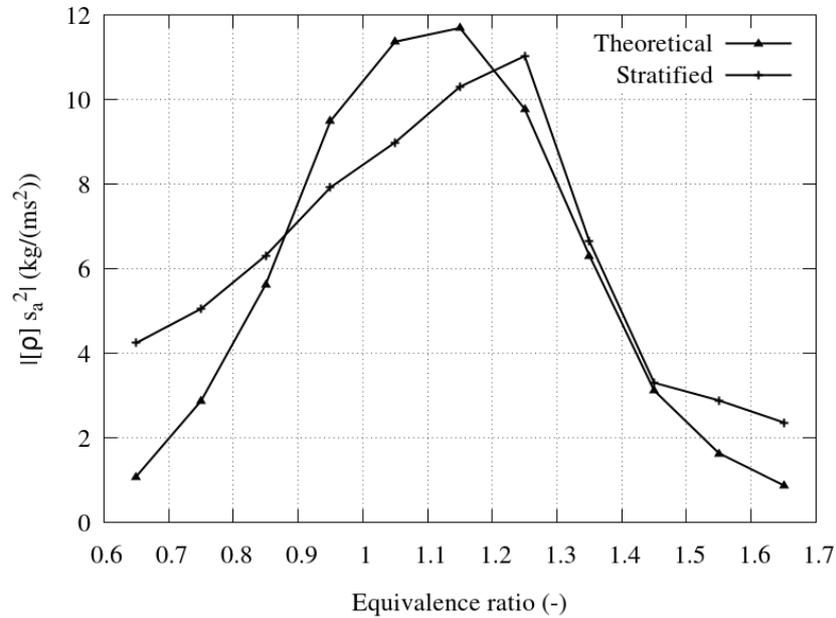


Fig 5.41 – Courbes de $[\rho]s_a^2$ théorique et simulé pour le cas stratifié en fonction de la richesse, à $t = 4$ ms.

Le but étant de voir si le saut d'impulsion tend à s'homogénéiser sur l'ensemble du front de flamme, le terme $[\rho]s_a^2$ doit être multiplié par la surface. Pour le calcul des valeurs théoriques, les valeurs trouvées précédemment sont multipliées par les surfaces issues du cas 3D turbulent. La figure 5.42 est obtenue.

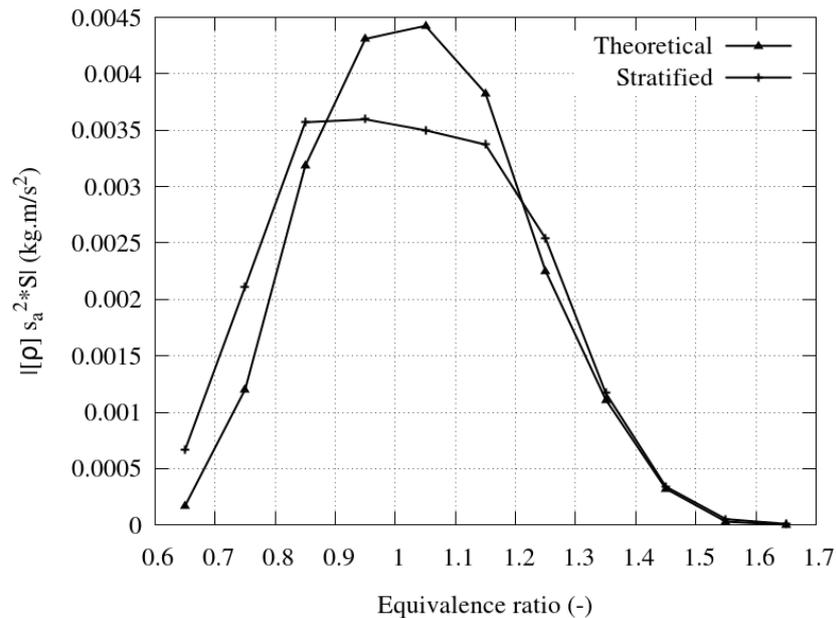


Fig 5.42 – Courbes du saut d'impulsion ($[\rho]s_a^2 * S$) théorique et simulé pour le cas stratifié en fonction de la richesse, à $t = 4$ ms.

La seconde équation provient du bilan de masse,

$$S_s(|\rho_{BG}u_{BG}|)_s = S_f(|\rho_{BG}u_{BG}|)_f, \quad (5.20)$$

Nous avons vu dans la section 4.5.7.3 qu'il était possible d'exprimer la vitesse dans les gaz brûlés en fonction de la vitesse absolue et de la vitesse laminaire (équation (4.22)). A partir de cette définition, la valeur théorique est déterminée,

$$(\rho_{BG}u_{BG})_{th} = \rho_{BG} \left(\frac{\rho_{FG}S_L}{\rho_{BG}} \right) + \rho_{FG}S_L. \quad (5.21)$$

Le résultat est tracé sur la figure 5.43.

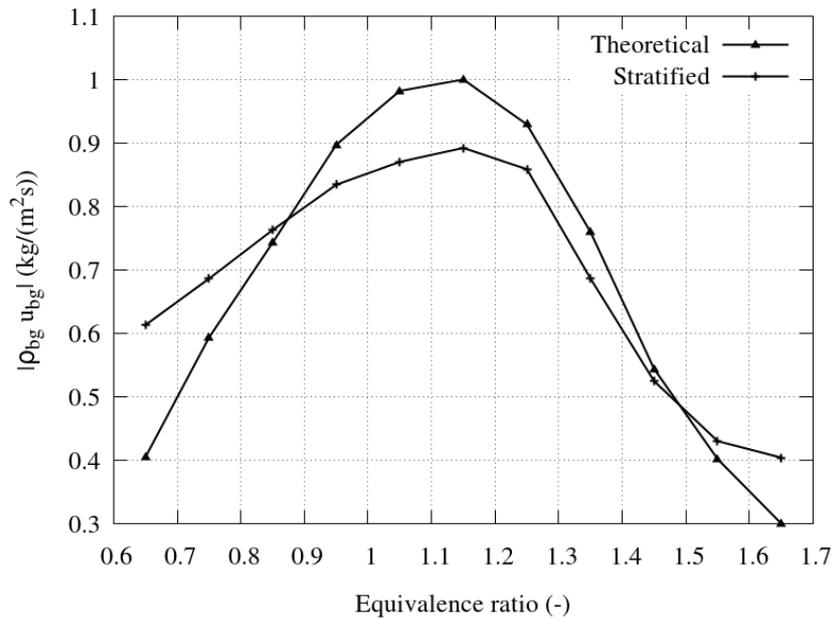


Fig 5.43 – Courbes du bilan de masse ($|\rho_{BG}u_{BG}|$) théorique et simulé pour le cas stratifié en fonction de la richesse, à $t = 4$ ms.

Comme attendu, les valeurs obtenues dans le cas $3D$ pour les mélanges très pauvres et très riches sont supérieures aux valeurs théoriques, à la fois pour le saut d'impulsion comme pour le débit massique. Au contraire, pour des richesses proches de la stœchiométrie les valeurs sont inférieures aux valeurs théoriques. On peut alors penser que, tout comme en laminaire, le saut d'impulsion tend à s'homogénéiser sur le contour de flamme.

La limite côté pauvre entre les flammes "rapides" et les flammes "lentes" devient alors claire, elle se situe à $\varphi = 0.85$. Du côté riche par contre, cette limite est moins visible. Sur la figure 5.41, elle est située à $\varphi = 1.25$, tandis qu'elle est seulement à $\varphi = 1.45$ sur la figure 5.43.

Afin de mieux préciser cette valeur, le troisième point du modèle est regardé. Celui-ci concerne le rapport de surface de flamme. Les surfaces de flamme obtenues pour chaque bande sont répertoriées dans la table 5.6.

Le tableau 5.6 ainsi que la figure 5.42 montrent bien que la proportion de surface de flamme ayant une richesse supérieure à $\varphi = 1.25$ est relativement faible comparée au reste de la surface. La valeur $\varphi = 1.25$ est donc retenue comme limite côté riche. De plus, à partir de cette valeur de richesse, la vitesse laminaire de la flamme diminue.

Des valeurs moyennes de $[\rho]s_a^2$ et de $|\rho_{BG}u_{BG}|$ sont calculées, à la fois pour la partie lente et pour la partie rapide. Le rapport de surface est aussi évalué.

Richesse	Surface (cm ²)	Richesse	Surface (cm ²)
0.6 – 0.7	1.569	1.2 – 1.3	2.302
0.7 – 0.8	4.184	1.3 – 1.4	1.760
0.8 – 0.9	5.658	1.4 – 1.5	1.028
0.9 – 1.0	4.539	1.5 – 1.6	0.181
1.0 – 1.1	3.893	1.6 – 1.7	0.0395
1.1 – 1.2	3.274		

Tableau 5.6 – Surface de flamme par bande de richesse de $\Delta_\varphi = 0.1$.

S_s/S_f	$([\rho]s_a^2)_f/([\rho]s_a^2)_s$	$(\rho_{BG}u_{BG})_f/(\rho_{BG}u_{BG})_s$
1.428	1.735	1.394

Tableau 5.7 – Bilan du rapport de surface calculé (S_s/S_f) et de ceux obtenus par les deux équations du modèle.

Les résultats obtenus sont listés dans la table 5.7.

Bien que le cas soit complètement instationnaire, le modèle simplifié donne des résultats en adéquation avec le rapport de surface réel. En effet, le rapport de surface calculé est compris entre les deux valeurs obtenues par le modèle. La flamme est observée à $t = 4$ ms, ce qui peut expliquer les écarts du modèle. Il a été vu dans la section 4.5.7 que la dynamique dans les gaz brûlés s'installaient après quelques milli-secondes. Il s'agit ici des premiers instants où elle peut être observée. Lors d'une combustion stratifiée, une dynamique au sein des gaz brûlés est toujours présente. Le saut d'impulsion essaie de s'homogénéiser sur le contour de flamme, ce qui réduit l'asymétrie de la flamme.

5.6.8 Étude de la flamme à l'aide des harmoniques sphériques

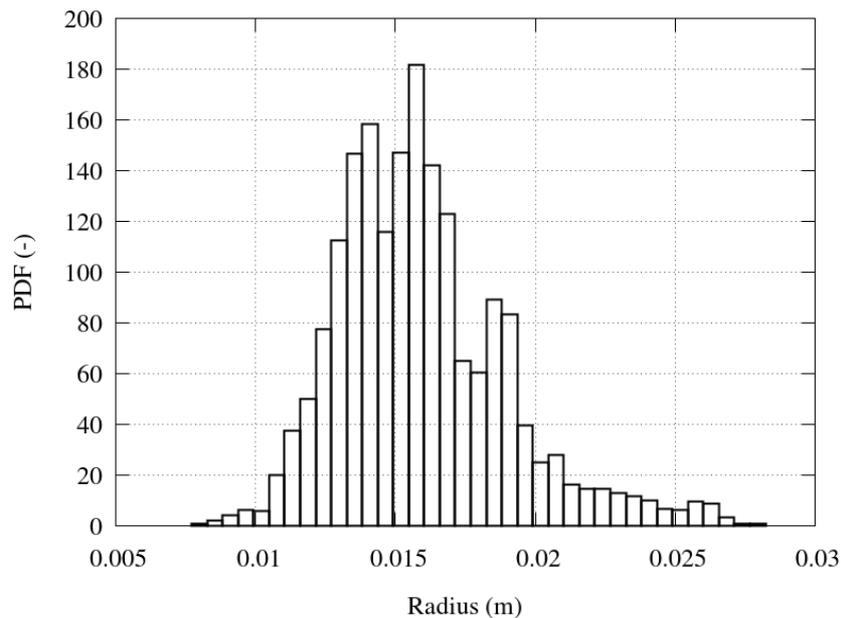
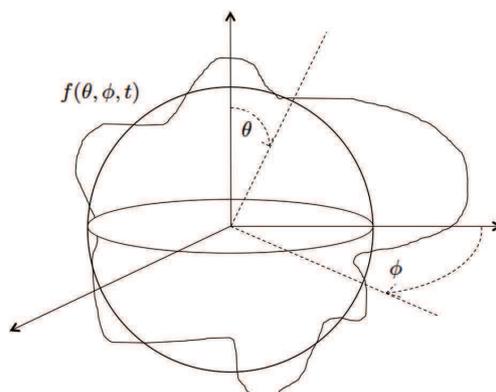
Les déformations de la flamme par rapport à son rayon moyen sont ici étudiées à l'aide des harmoniques sphériques. Pour cela, le contour de flamme doit d'abord être reconstruit à l'aide de ses coordonnées sphériques discrétisées.

La colatitude θ et la longitude ϕ sont discrétisées à l'aide de corbeilles d'amplitude $\pi/100$ rad. Dans chaque corbeille, les valeurs moyennes du rayon, de la vitesse absolue, de la richesse et de la vitesse laminaire sont mises en mémoire. Si une corbeille est vide, ce qui peut être le cas aux extrémités de la flamme, les valeurs des scalaires sont mises à zéro. Le rayon moyen est calculé à l'aide des deux rayons moyens non nuls les plus proches.

L'expansion du noyau de flamme peut se voir comme une expansion sphérique déformée par la stratification rencontrée ainsi que par la vitesse initiale du jet. La fonction densité de probabilité (PDF) du rayon de la flamme instantanée est tracée à $t = 5$ ms sur la figure 5.44. A cet instant, le rayon moyen est égal à $r_{moy} = 1.61$ cm. La PDF est relativement centrée par rapport à cette valeur. Seul 22 % des points possèdent une déformation du rayon par rapport au rayon moyen supérieure à 20 %. Par conséquent, les déformations du front sont considérées comme faibles par rapport au rayon moyen de la sphère.

Le rayon peut être vu comme une fonction temporelle de la colatitude et de la longitude. Une esquisse de cette approche est donnée sur la figure 5.45.

Les déformations du front étant faibles par rapport au rayon moyen de la sphère, la fonction

Fig 5.44 – PDF du rayon de la flamme instantanée à $t = 5$ ms.Fig 5.45 – Esquisse du contour en tant que déformation d'une sphère. Le rayon devient une fonction des angles θ et ϕ ainsi que du temps.

$f(\theta, \phi, t)$ s'écrit

$$f(\theta, \phi, t) = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n {}'P_n^m(ar_{m,n} \cos m\phi + ai_{m,n} \sin m\phi), \quad (5.22)$$

où P_n^m sont les fonctions de Legendre associées. Le prime qui apparaît dans la somme indique que le premier terme correspondant à $m = 0$ est multiplié par 0.5.

Si l'on définit

$$\alpha_{n,m} = \frac{2n+1}{2\pi} \frac{(n-m)!}{(n+m)!}, \quad (5.23)$$

les expressions des coefficients de l'équation (5.22) sont,

$$ar_{m,n} = \alpha_{m,n} \int_0^{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\theta, \phi, t) P_n^m(\theta) \cos m\phi \cos \theta d\theta d\lambda, \quad (5.24)$$

$$ai_{m,n} = \alpha_{m,n} \int_0^{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(\theta, \phi, t) P_n^m(\theta) \sin m\phi \cos \theta d\theta d\lambda. \quad (5.25)$$

Les équations 5.24 et 5.25 constituent l'analyse d'un scalaire en harmoniques sphériques. Il s'agit de la transformée directe tandis que l'équation (5.22) correspond à la transformée inverse.

Grâce aux harmoniques sphériques, les différentes déformations de la flamme peuvent être quantifiées. En effet, selon les modes n, m conservés, des caractéristiques spécifiques de la flamme sont obtenues.

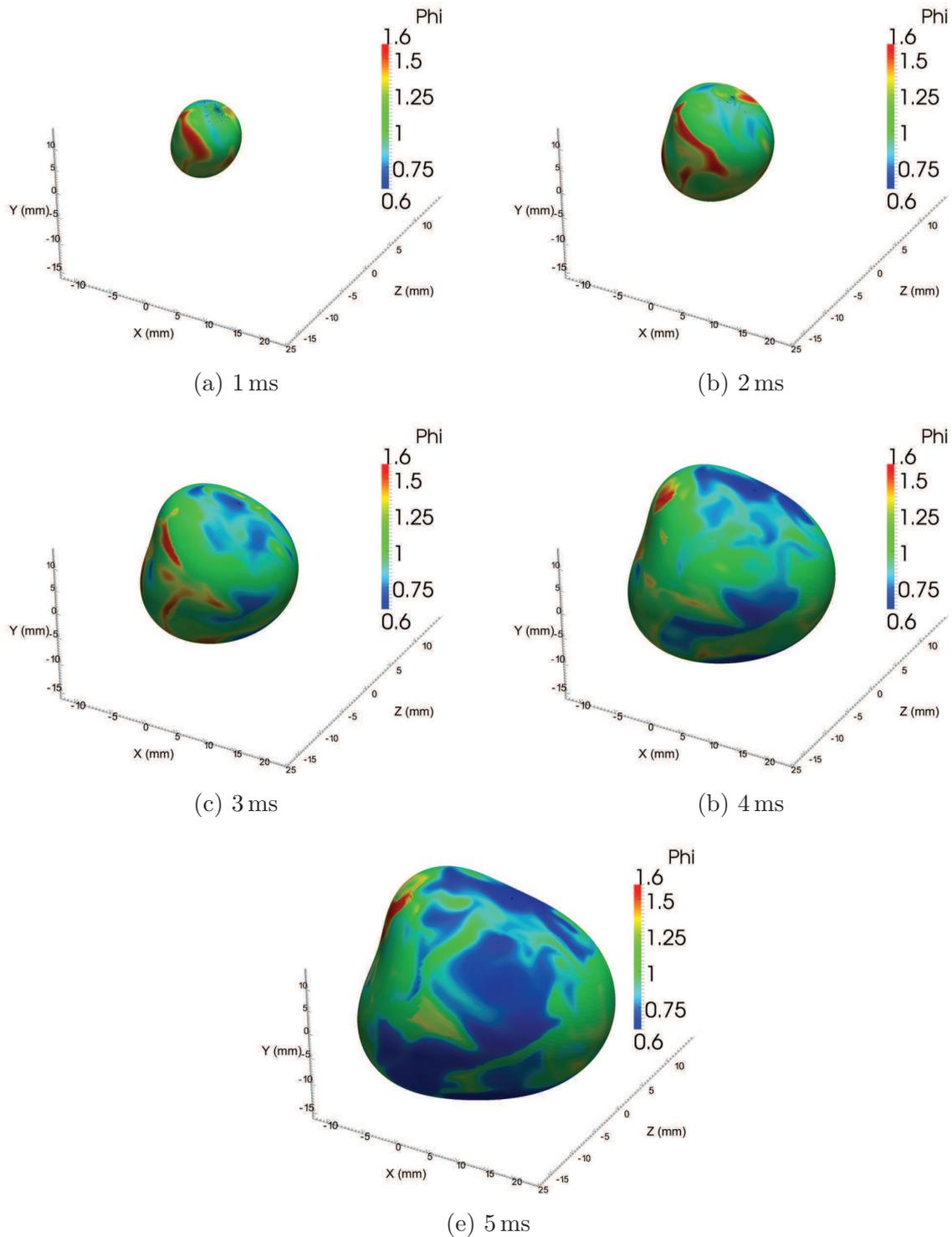


Fig 5.46 – Evolution temporelle de la forme globale de la flamme décrite par les modes 0 à 3, coloriée par φ .

Tout d'abord, le rayon moyen de la sphère est obtenu si uniquement le premier mode est conservé. En ajoutant les premiers modes, de 1 à 3, une forme globale montrant la direction privilégiée de la flamme est trouvée. L'évolution de la forme globale pour laquelle les modes 0 à 3 sont conservés est donnée sur la figure 5.46 pour un cas instantané.

Concernant la forme de la flamme, l'élongation dans la direction axiale, surtout du côté droit de la boîte est clairement visible. De la même manière, l'impact du jet sur l'arrière de la flamme creuse un trou de plus en plus clair. L'évolution de la flamme sur sa partie arrière est complètement bloquée et aucune interaction avec la paroi n'aura lieu de ce côté. Une forme symétrique autour de la direction axiale se met en place, aucune des directions transverses n'est privilégiée. La présence de poches de gaz est visible, le mélange ne passe pas du plus riche au plus pauvre de manière régulière. La flamme rencontre de forts gradients. Au cours du temps, le mélange tend à s'appauvrir ce qui est la tendance attendue.

Les modes suivants servent à la détection des déformations secondaires de la flamme. Ces modes sont plus petits et ne sont pas clairement visibles. Afin de les analyser tout en gardant la forme de la flamme, les premiers modes de 0 à 3 sont conservés et les suivants sont multipliés par 2. Un cas instantané est analysé et colorié par différentes variables à $t = 5$ ms, figure 5.47.

La figure 5.47 démontre que la déformation n'est pas directement corrélée à la richesse de la flamme. En effet, sur le premier plan, une déformation est clairement visible alors qu'il s'agit de l'endroit où la flamme est la plus pauvre, ce qui signifie par ailleurs qu'elle est plus sensible à la turbulence. De plus, la déformation aux endroits où le mélange est le plus riche est loin d'être la plus importante. Regardons maintenant la surface coloriée par la vitesse laminaire. Le lieu où la vitesse laminaire est plus grande présente une grande déformation.

La relation entre vitesse et déformation est d'autant plus visible au regard de l'image coloriée par la vitesse absolue. Toutes les pointes des déformations possèdent des vitesses absolues plus élevées que le reste de la surface. La vitesse absolue dépend donc à la fois de la vitesse du fluide et de la richesse.

5.7 Conclusion

Dans un premier temps, l'injection instationnaire d'un mélange riche dans un volume fermé contenant un mélange pauvre a été effectuée. Le code n'était jusqu'à présent pas adapté pour traiter des volumes fermés. Par conséquent, l'évolution temporelle de la pression a dû être prise en compte. De plus, une richesse d'injection équivalente ainsi que les paramètres pour la turbulence sont déterminés afin de reproduire l'expérience le plus fidèlement possible. Le but de l'injection était de réaliser un mélange stratifié turbulent dans le domaine. Des exemples de champs de vitesse et richesse instantanés au moment de l'allumage sont fournis. Des moyennes d'ensemble ont aussi été effectuées grâce à la réalisation de six simulations et comparées aux résultats expérimentaux.

L'expansion d'un noyau de flamme dans un tel milieu a ensuite été observée. Afin d'analyser au mieux les vitesses de flamme, une nouvelle méthode de mesure de vitesse, basée sur la méthode de level-set, particulièrement bien adaptée aux flammes stratifiées, a été proposée. L'influence de la courbure sur la vitesse laminaire de flamme a été analysée.

L'évolution temporelle de la forme du noyau a aussi été observée grâce aux harmoniques sphériques. La forme globale est tout d'abord examinée à l'aide des premiers modes. Il est ensuite trouvé que les déformations de la flamme, caractérisées par les modes secondaires, sont directement liées à la vitesse absolue, soit à la vitesse du fluide et à la turbulence présente au sein du domaine.

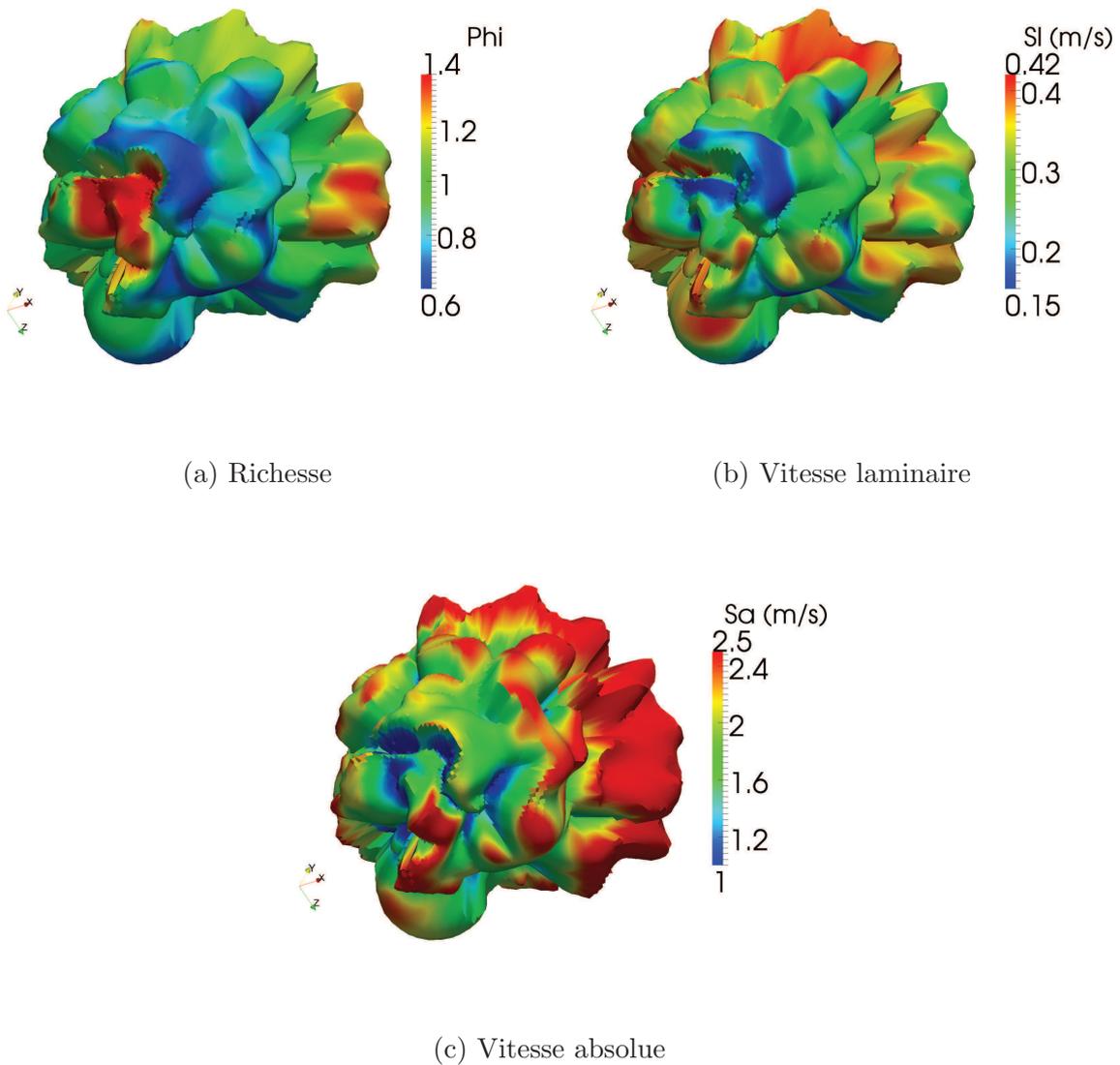


Fig 5.47 – Harmoniques sphériques avec les modes multipliés par 2 à partir du 4^{eme}, coloriées par différentes variables à $t = 5$ ms.

Toutes les simulations présentées dans ce chapitre ont été effectuées avec de la chimie tabulée par la méthode PCM-FPI. Les concordances entre les résultats trouvés et les résultats expérimentaux montrent bien qu'une telle tabulation est capable de reproduire les principaux effets de la stratification.

Extension de l'analyse par une dilution en EGR

Sommaire

6.1	Introduction	177
6.2	Présentation des simulations	178
6.2.1	Dilution en gaz brûlés	178
6.2.2	Conditions initiales	178
6.3	Propagation d'une flamme avec présence d'EGR	180
6.3.1	Cas homogènes	180
6.3.2	Forme du noyau des cas stratifiés par une dilution en EGR	181
6.3.3	Vitesse de flamme	182
6.4	Comparaison avec une stratification en gaz frais	184
6.4.1	Forme de la flamme	184
6.4.2	Diffusion des espèces et de la température	185
6.4.3	Vitesses de flamme	187
6.4.4	Dynamique dans les gaz brûlés	188
6.5	Flamme établie rencontrant des EGR	189
6.6	Conclusion	191

6.1 Introduction

Dans les chapitres précédents, le développement d'une flamme dans un milieu stratifié en gaz frais, laminaire et turbulent, a été analysé. L'objectif de cette thèse étant de rendre compte d'un ensemble de phénomènes présents dans une chambre de combustion de moteur automobile, il paraît aussi important de traiter la problématique de la combustion en présence de gaz brûlés. En effet, des gaz brûlés résiduels provenant du cycle précédent ou bien volontairement réintroduits dans le cylindre (afin de modifier les caractéristiques de la combustion) peuvent se trouver dans la chambre. Cette thèse se termine par l'étude du développement d'un noyau de flamme dans un milieu stratifié par une dilution en gaz brûlés froids. Faute de temps, le développement du noyau de flamme dans un milieu stratifié par une dilution en gaz brûlés chauds ne pourra pas être ici abordé.

Un des avantages majeurs de l'implantation de la chimie complexe dans le code de calcul réside dans la possibilité d'introduire des gaz de composition et de température variables au sein du domaine. De ce fait, les simulations présentées dans ce chapitre sont uniquement réalisées avec la chimie complexe. En chimie tabulée, pour une température et une composition initiale de gaz brûlés données, il serait possible de rajouter une dimension à la table qui serait le taux d'EGR. Cependant, chaque modification de composition ou de température initiale des gaz brûlés entraînerait des dimensions supplémentaires.

Toutes les simulations réalisées dans ce chapitre reprennent le domaine et le maillage présentés dans le chapitre 4, section 4.5.1.1, c'est-à-dire un domaine circulaire de rayon 40 cm et une

discrétisation spatiale de $40 \mu\text{m}$ dans le volume où la flamme évolue. Pour entamer ce chapitre, les conditions des cas effectués sont présentées. Des simulations en milieu homogène composé de gaz frais dilués en gaz brûlés (EGR) sont réalisées. Ensuite, des stratifications gaz frais/gaz frais dilués par des EGR sont analysées. Afin de bien comprendre l'influence des gaz brûlés, des comparaisons avec des stratifications gaz frais/gaz frais, soit une stratification en richesse, sont effectuées. Pour finir, une flamme rencontrant une bande de gaz brûlés est observée.

6.2 Présentation des simulations

6.2.1 Dilution en gaz brûlés

Les stratifications étudiées jusqu'à présent portaient sur la richesse du mélange. A présent, des stratifications par des gaz brûlés froids sont observées dans les limites d'inflammabilité, incluant ainsi la dilution des gaz frais par des gaz brûlés.

Le taux de dilution peut se définir selon :

$$\tau_{EGR}(\%) = \left(\frac{m_{EGR}}{m_{mélange}} \right) \times 100, \quad (6.1)$$

où le mélange fait référence à la masse d'air plus la masse de carburant frais, et non la masse totale.

Une large gamme de taux de dilution est simulée afin de voir quelles sont les limites d'inflammabilité dans de tels mélanges et configurations. Les taux étudiés sont au nombre de huit et valent : 0, 5, 10, 15, 25, 30, 40 et 50 %.

Une unique valeur de la richesse est considérée. Il s'agit de $\varphi = 0.95$, déjà présente dans le cas C3 du chapitre 4. L'utilisation de la chimie complexe le permettant, toutes les espèces présentes dans la composition des gaz brûlés sont prises en compte. Une flamme mono-dimensionnelle en propagation libre est calculée avec le code de chimie détaillée Cantera [34] afin d'obtenir la composition des gaz à l'équilibre.

6.2.2 Conditions initiales

Les simulations étant réalisées en chimie complexe, le schéma cinétique semi-détaillé pour la combustion propane/air développé au cours de cette thèse et présenté en annexe A est utilisé.

Trois types de simulations sont ici réalisées. Dans tous les cas, la température des gaz présents dans le domaine à l'instant initial est $T = 300 \text{ K}$. Le comportement de la flamme dans un milieu homogène constitué de gaz frais dilués par des EGR est observé en premier lieu.

Dans un second temps, la configuration du cas C3 étudié dans le chapitre 4 est reprise. Pour rappel, le cas C3 fait référence à la propagation d'une flamme stratifiée propane/air dans un milieu laminaire. Une bande de mélange de richesse $\varphi = 0.95$ d'épaisseur 4 mm est située de manière symétrique autour de l'axe X . La transition entre ce mélange et le mélange pauvre de richesse $\varphi = 0.6$ est effectuée à l'aide d'une tangente hyperbolique d'épaisseur 0.5 mm. L'allumage de la flamme a lieu au centre du domaine, soit dans le mélange de richesse $\varphi = 0.95$. Le rayon du noyau de flamme initial est égal à 0.7 mm. Dans ce chapitre, la bande de gaz frais de richesse $\varphi = 0.95$ est conservée. Le mélange pauvre est remplacé par un mélange de richesse $\varphi = 0.95$ dilué en gaz brûlés. Les gaz brûlés servant à la dilution sont issus de la combustion d'un mélange de gaz frais à la température $T = 300 \text{ K}$ possédant la richesse $\varphi = 0.95$. Le mélange propane/air non dilué est situé au centre et le mélange dilué sur l'extérieur du domaine. Cette configuration rappelle la méthode de stratification radiale pour les moteurs à combustion où le mélange air/carburant est situé au centre du cylindre et le mélange d'EGR à sa périphérie [73, 118].

Pour finir, ces simulations sont comparées à des stratifications de richesse en gaz frais. La bande de mélange "riche" reste encore une fois inchangée. Le reste du mélange est calculé pour contenir un mélange de gaz frais possédant la même quantité de carburant que celle présente dans les différents mélanges dilués étudiés.

Les fractions massiques du propane et par conséquent les différentes richesses ainsi obtenues sont répertoriées dans le tableau 6.1.

Cas	$D0$	$D1$	$D2$	$D3$	$D4$	$D5$	$D6$	$D7$
$Y_{C_3H_8} \times 10^2$	5.7290	5.4562	5.2082	4.9817	4.5832	4.4069	4.0921	3.8193
$\tau_{EGR}(\%)$	0	5	10	15	25	30	40	50
φ_{FG}	0.95	0.90	0.86	0.82	0.75	0.72	0.67	0.62

Tableau 6.1 – Fraction massique de propane et richesse en gaz frais correspondant aux différents taux de dilution étudiés.

Afin de différencier les cas présentant une dilution en gaz brûlés de ceux présentant une stratification en richesse sans dilution, les cas seront respectivement dénommés Dx_{EGR} et Dx_Z . L'indice Z correspond à la fraction de mélange.

Les profils de la fraction massique de propane le long de l'axe Y sont représentés sur la figure 6.1 pour les différents cas.

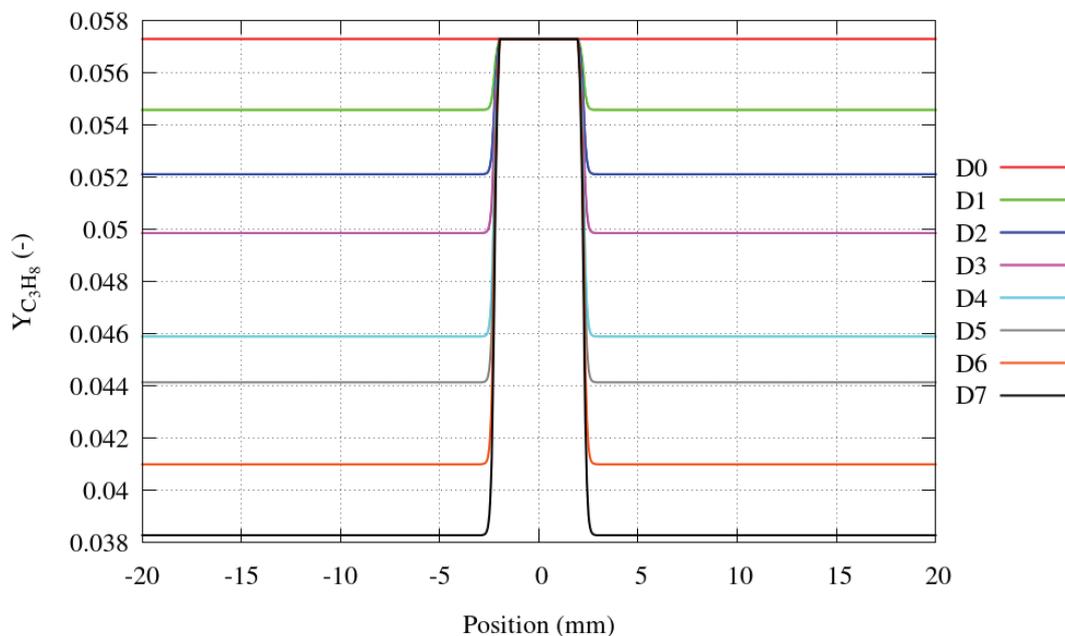


Fig 6.1 – Profils initiaux de la fraction massique de propane le long de l'axe Y pour les différents cas.

L'initialisation du noyau de flamme est réalisée de manière similaire à celle présentée dans la section 4.3.2.

6.3 Propagation d'une flamme avec présence d'EGR

6.3.1 Cas homogènes

Le comportement de la flamme évoluant dans un milieu homogène constitué de gaz frais dilués en gaz brûlés à la température $T = 300\text{ K}$ est tout d'abord observé. Le développement de la flamme est similaire à celui d'une flamme en milieu homogène constitué uniquement de gaz frais, c'est-à-dire une expansion cylindrique.

Le rayon de la flamme en fonction du taux d'EGR à un instant donné, ici $t = 7\text{ ms}$, est présenté sur la figure 6.2.

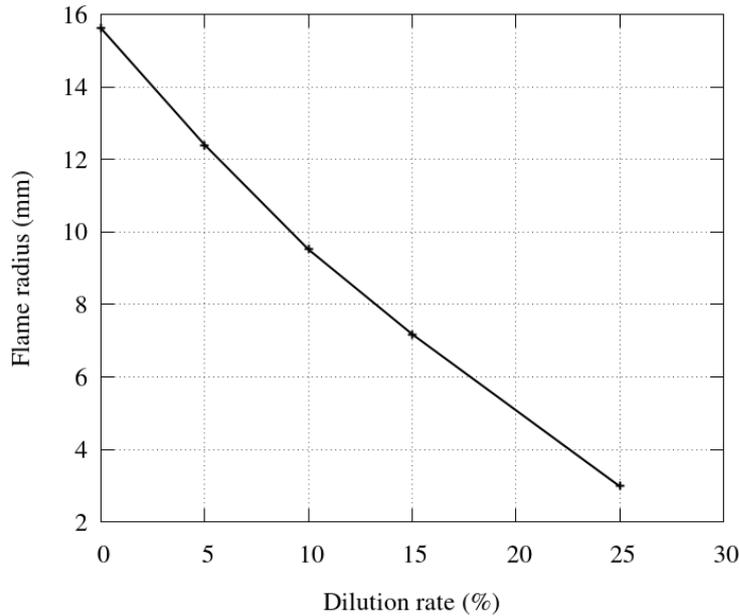


Fig 6.2 – Rayon de flamme en fonction du taux de dilution à un instant donné, $t = 7\text{ ms}$.

Le rayon évolue de manière linéaire en fonction du taux de dilution. Le coefficient de la pente est de $5 \cdot 10^{-3}\text{ mm}/\%$. Les taux de dilution supérieurs à 25 % ne sont pas représentés sur la figure 6.2. Cela s'explique par le fait qu'à partir de $\tau_{EGR} = 30\%$, la flamme s'éteint. Pour un taux de dilution égal 25 %, la flamme montre déjà des difficultés à se propager. En effet, à $t = 7\text{ ms}$, son rayon n'excède pas 3 mm alors que le rayon de flamme initial est de 0.7 mm.

La simulation du $\tau_{EGR} = 30\%$ est comparable au cas $C1$ présenté dans la section 4.5.2. Le noyau commence à se développer mais est contraint de s'éteindre après quelques milli-secondes. Là aussi, l'extinction semble être due au trop fort taux d'étirement. La richesse du cas $C1$, $\varphi = 0.6$, était proche de la limite pauvre d'inflammabilité du propane. On peut en déduire que la limite d'inflammabilité d'un mélange dilué en EGR propane/air se situe aux alentours de 25 %. Il paraît alors peu pertinent de réaliser les simulations homogènes avec des taux de dilution plus importants.

Dans le chapitre 4, il est montré que des flammes dont la richesse est proche des limites d'inflammabilité n'arrivent pas à se développer en deux dimensions. La propagation de ces mêmes flammes ne présente aucune difficulté en une dimension. La difficulté d'allumage en deux dimensions a plusieurs causes. Tout d'abord, le fort taux d'étirement lors des premiers instants de propagation, cependant, celui-ci décroît très rapidement. Le second point provient des pertes thermiques et de la taille du rayon d'allumage. Il existe en effet une notion de rayon critique en dessous duquel le noyau ne peut subsister. Si le noyau de flamme est trop petit, les

réactions chimiques ne dégagent pas assez de chaleur pour compenser les pertes de chaleur par conduction. Pour des flammes propane/air en expansion sphérique à pression atmosphérique, ce rayon critique est de 0.2 – 0.4 mm pour une flamme à la stoechiométrie et 1 – 2 mm pour une flamme pauvre de richesse $\varphi = 0.6$ [15, 199, 200].

Un moyen pour contourner cette difficulté d'allumage est donc d'établir la flamme dans un milieu plus riche avant de la laisser se propager dans le milieu dont la richesse est proche des limites d'inflammabilité. La prochaine section précisera que cela est aussi valable pour des mélanges dilués en gaz brûlés.

6.3.2 Forme du noyau des cas stratifiés par une dilution en EGR

La stratification à iso-richesse entre la bande de mélange non dilué et le mélange dilué en gaz brûlés entraîne une déformation de la flamme. Dans ces deux mélanges, la proportion propane/air est identique sauf que des gaz brûlés sont présents dans le mélange dilué. Par conséquent, la fraction massique de propane dans le mélange dilué est inférieure à celle de propane de la bande de mélange de richesse $\varphi = 0.95$ non dilué. De plus, les espèces présentes dans les gaz brûlés ne favorisent pas la combustion. Par conséquent, la vitesse de combustion est diminuée, tout comme la température.

Cette déformation, visible sur la figure 6.3, est très semblable à celle obtenue lors de la stratification en gaz frais. Un comportement similaire entre la stratification en gaz frais et la stratification par un mélange dilué en gaz brûlés est à prévoir.

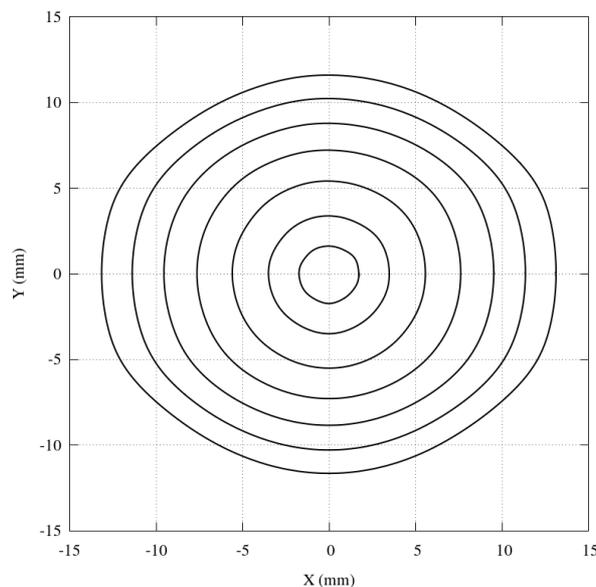


Fig 6.3 – Contour de flamme du cas $D4_{EGR}$. Le contour de flamme est tracé à chaque milli-seconde, de 1 à 7 ms.

Afin d'évaluer l'évolution de la déformation en fonction du taux de dilution, le coefficient d'asymétrie L_x/L_y défini dans le chapitre 4 est tracé en fonction du temps, figure 6.4.

La légère asymétrie, $L_x/L_y < 1.05$, visible durant les premières milli-secondes est due à l'initialisation du noyau et est ici considérée comme non significative.

Tout comme pour la stratification en gaz frais, une élongation de la flamme dans la direction axiale est présente. Le coefficient d'asymétrie prend des valeurs sensiblement supérieures à 1 dès que la flamme rencontre le mélange dilué. Cependant, les valeurs obtenues pour des taux de dilutions inférieurs ou égaux à 15 % (de $D1_{EGR}$ à $D3_{EGR}$) restent très faibles, inférieures à 1.1.

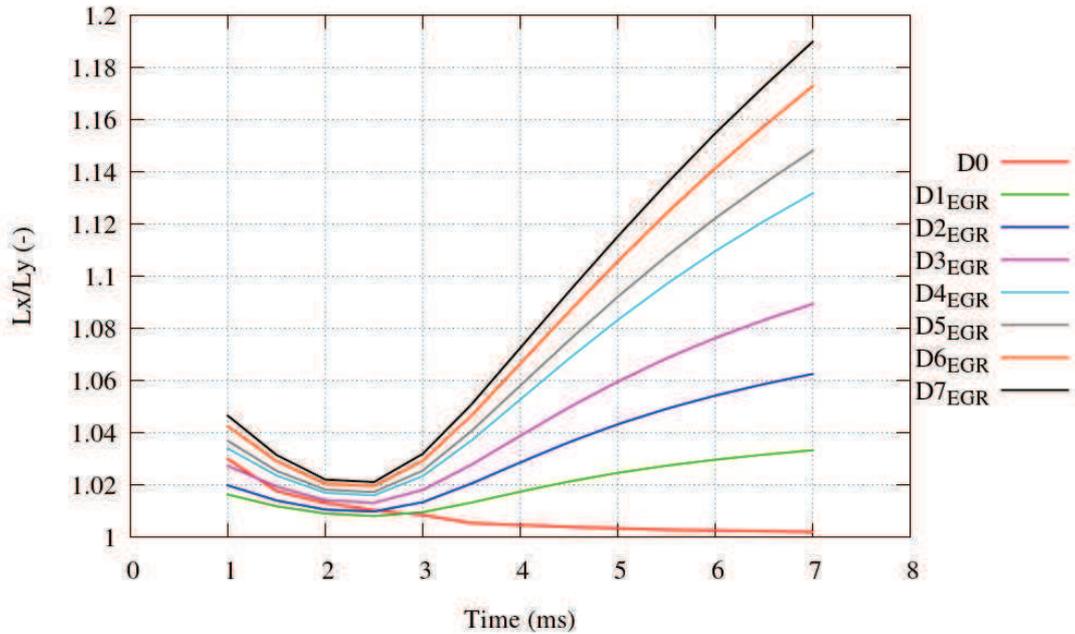


Fig 6.4 – Evolution temporelle du coefficient d'asymétrie pour différents taux de dilution.

A $t = 7$ ms, le coefficient d'asymétrie du cas $D4_{EGR}$ vaut 1.13. Si l'on examine la figure 6.2, on remarque que le rapport du rayon de la flamme homogène non diluée sur celui de la flamme homogène diluée à 25 % en gaz brûlés froids, au même instant, est égal à 5.2. Tout comme pour la stratification en gaz frais, la flamme tend à minimiser les efforts qui s'exercent sur elle. L'asymétrie est moins importante que prévue.

Un autre point visible sur la figure 6.4 est que la flamme peut se propager dans des milieux dilués à 50 % en EGR lorsque la combustion est initiée dans un milieu non dilué. L'établissement de la flamme dans un milieu non dilué durant quelques milli-secondes permet ainsi la propagation de la flamme dans des domaines dilués plus importants. Le mélange dilué est rencontré typiquement à partir de 3 ms dans les situations étudiées. L'allumage de la flamme dans un milieu plus favorable à son développement ainsi que la réduction du taux d'étirement repoussent les limites d'inflammabilité des mélanges dilués en gaz brûlés.

6.3.3 Vitesse de flamme

L'évolution de la vitesse absolue de flamme au niveau des points 1 et 2, figure 4.28, est représentée sur les figures 6.5 et 6.6. Pour rappel, le point 1 correspond au point de la flamme situé sur l'axe Y positif, donc rencontrant le mélange dilué en gaz brûlés. Le point 2, quant à lui, est le point de la flamme situé sur l'axe X , là où le mélange est toujours non dilué.

Chaque courbe tend vers une asymptote. Cependant, celle-ci n'est pas atteinte après 7 ms. La durée physique des simulations a été limitée par les ressources CPU disponibles.

Dans le chapitre 4, le degré de stratification a été étudié en faisant varier la richesse du mélange contenu dans la bande de mélange "riche", cas $C3$ et $C4$. Ici, la richesse et la composition du mélange de la bande centrale restent inchangées. L'étude du degré de stratification est effectuée en modifiant le taux de dilution du mélange rencontré par la flamme établie.

Cette différence explique les comportements visibles sur les figures 6.5 et 6.6 qui diffèrent de ceux étudiés jusqu'à présent. En effet, lors de l'étude de la stratification en gaz frais, un écart était observé sur les valeurs de la vitesse absolue pour les différents cas pendant les premières milli-secondes. Dans le cas présent, les courbes se superposent jusqu'à $t = 2.5$ ms. Ce temps correspond

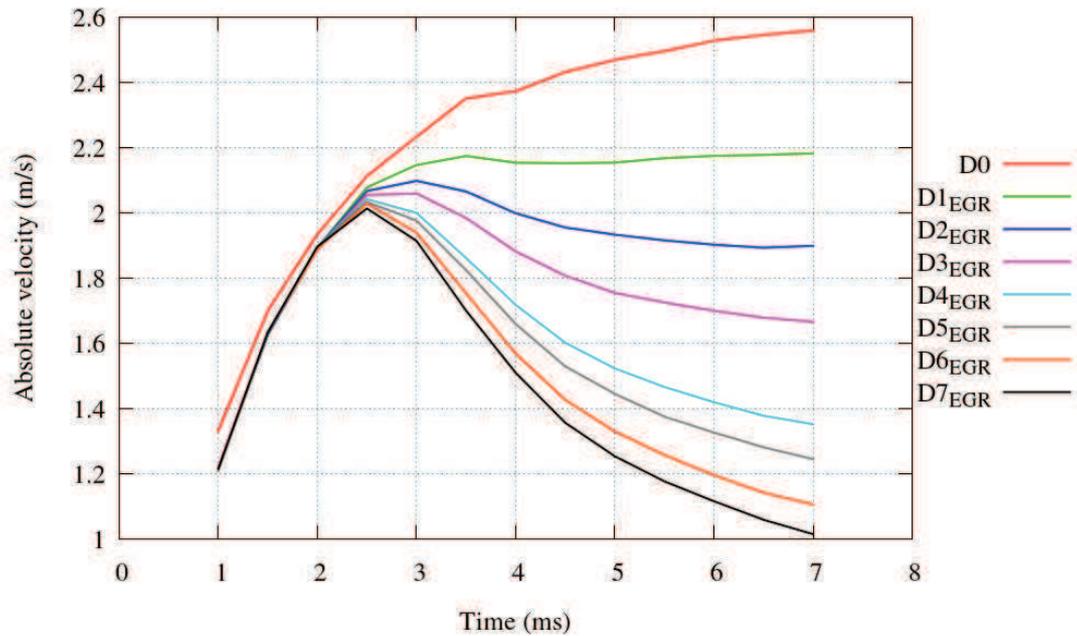


Fig 6.5 – Evolution temporelle de la vitesse absolue pour différents taux de dilution au point 1.

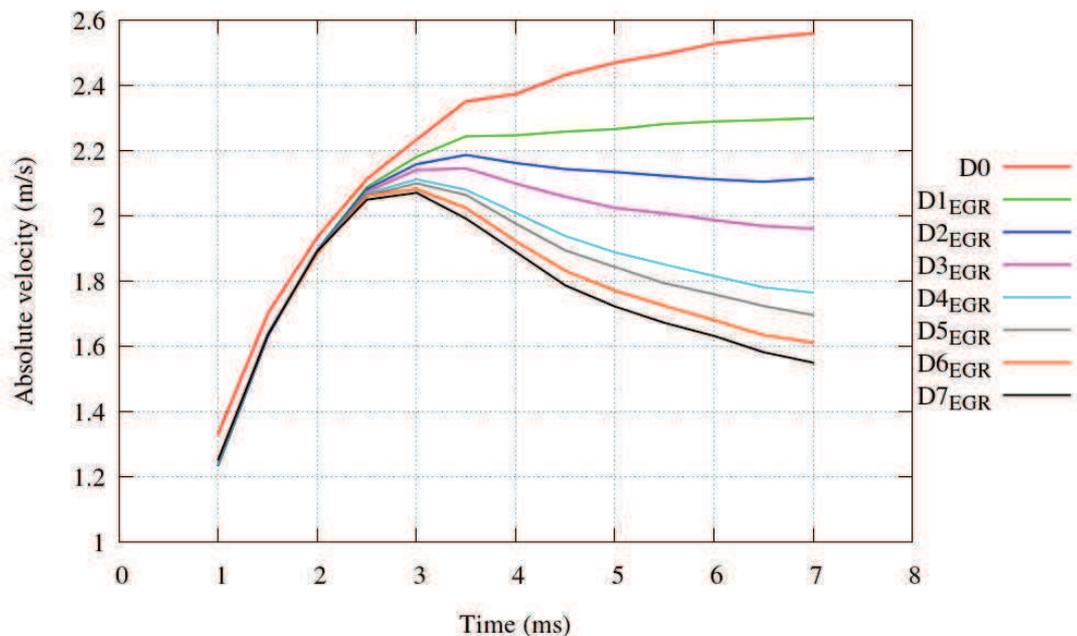


Fig 6.6 – Evolution temporelle de la vitesse absolue pour différents taux de dilution au point 2.

à l'instant où la flamme rencontre pour la première fois la stratification par le mélange dilué en gaz brûlés le long de l'axe Y . Avant cet instant, la flamme évolue dans un milieu homogène non dilué.

Que ce soit au niveau de l'axe X où le mélange est non dilué ou au niveau de l'axe Y où le gradient de dilution est maximal, la tendance des courbes est similaire. Plus le mélange rencontré est dilué en gaz brûlés, plus la vitesse absolue est lente. La décélération de la vitesse n'est cependant pas proportionnelle au taux de dilution. A $t = 7$ ms, l'écart entre les courbes des cas $D6_{EGR}$ et $D7_{EGR}$ est inférieur à celui entre les courbes des cas $D5_{EGR}$ et $D6_{EGR}$.

Les vitesses laminaires de tels mélanges n'étant pas calculées par des simulations mono-

dimensionnelles préliminaires, il ne paraît pas intéressant de montrer l'évolution de celles-ci. Le comportement de la vitesse laminaire le long de l'axe Y est comparable à celui de la vitesse absolue.

6.4 Comparaison avec une stratification en gaz frais

Afin de mieux évaluer le comportement de la flamme lors de sa rencontre avec des mélanges dilués en gaz brûlés, il paraît intéressant de comparer celui-ci à celui d'une flamme établie rencontrant une stratification en gaz frais. Les fractions massiques de propane des mélanges dilués sont conservées pour déterminer les richesses équivalentes des gaz frais.

6.4.1 Forme de la flamme

Premièrement, le cas dilué à $\tau = 25\%$ (cas $D4_{EGR}$) est comparé à son homologue en gaz frais, soit une richesse de $\varphi = 0.75$ (cas $D4_Z$). L'évolution temporelle du coefficient d'asymétrie est représentée sur la figure 6.7.

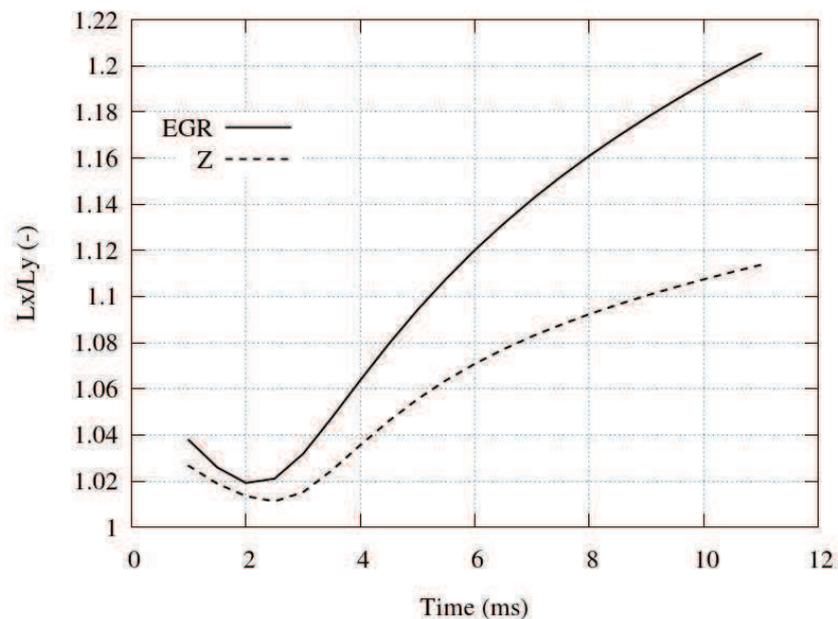


Fig 6.7 – Evolution temporelle du coefficient d'asymétrie pour le cas $D4$, rencontrant un mélange dilué en gaz brûlés ou un mélange de gaz frais plus pauvre.

A tout instant, la courbe de la flamme rencontrant un mélange plus pauvre est située en dessous de la courbe de la flamme rencontrant un mélange dilué en gaz brûlés. Lorsque la flamme rencontre une dilution en gaz brûlés, elle éprouve plus de difficulté à se propager que lorsqu'elle rencontre un milieu plus pauvre contenant la même proportion de carburant que le mélange dilué. De plus, à $t = 7$ ms, les valeurs de L_x pour les cas $D4_{EGR}$ et $D4_Z$ sont respectivement $L_x = 2.76$ cm et $L_x = 2.92$ cm. En plus de présenter une forme plus cylindrique, la flamme rencontrant un mélange plus pauvre est plus grande (en diamètre). Ces observations sont cohérentes du fait des vitesses laminaires des deux mélanges. En effet, d'après Cantera [34], le mélange dilué possède une vitesse laminaire égale à $s_L = 17.09$ cm/s tandis que celle du mélange de richesse $\varphi = 0.75$ est $s_L = 24.93$ cm/s. Plus de pertes thermiques sont présentes lors d'une propagation dans un milieu dilué en EGR.

Ce même coefficient d'asymétrie est maintenant observé à $t = 7$ ms pour les différents cas étudiés, figure 6.8.

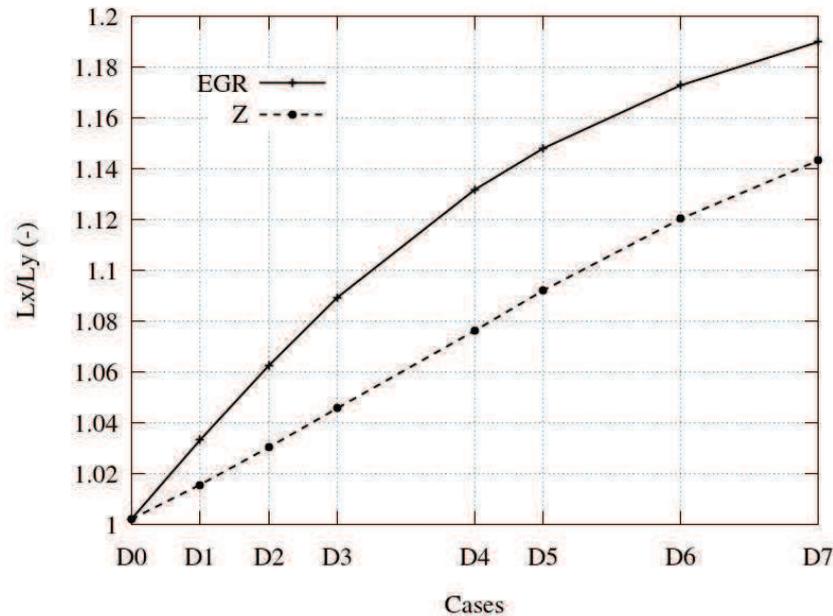


Fig 6.8 – Valeur du coefficient d'asymétrie pour les différents cas étudiés, à $t = 7$ ms.

Le coefficient d'asymétrie n'est pas proportionnel au taux de dilution. Pour des taux élevés, le coefficient d'asymétrie continue d'augmenter mais la pente est plus faible. Le comportement contraire, à savoir un coefficient d'asymétrie bien plus élevé pour des grands taux de dilution, pouvait être attendu. En effet, plus le mélange est dilué, plus il est difficile pour la flamme de se propager, comme cela a été vu pour les cas homogènes. De même, plus le taux de dilution est grand plus la vitesse laminaire de la flamme est petite. Dans tous les cas, l'asymétrie de la flamme est amoindrie par le fait que la flamme ait été établie dans un milieu non dilué.

Pour les cas stratifiés en gaz frais, le comportement semble plus linéaire. La flamme reste dans tous les cas moins asymétrique que pour les cas rencontrant une dilution.

6.4.2 Diffusion des espèces et de la température

Il a été vu qu'une des espèces diffusant le plus rapidement était le dihydrogène (H_2). Les champs de cette espèce sont présentés sur la figure 6.9 pour les cas $D4_Z$, $D4_{EGR}$ et $D7_{EGR}$.

Les champs des deux flammes rencontrant un mélange dilué par des EGR, $D4_{EGR}$ et $D7_{EGR}$, sont similaires. Sur l'axe Y , la diffusion du dihydrogène est symétrique par rapport au front de flamme, défini par l'iso-contour $C = 0.73$. Au niveau de l'axe X , l'espèce H_2 est présente sur une grande épaisseur. Le niveau de stratification ne semble pas avoir d'influence sur le champ de dihydrogène.

Le comportement du champ est différent pour le cas stratifié en gaz frais. Il est similaire à celui du cas $C4$ du chapitre 4. La diffusion est moins importante car il s'agit d'une stratification d'un mélange pauvre à un mélange pauvre, contrairement au cas $C4$ où une stratification d'un mélange riche à un mélange pauvre était présente. Moins de dihydrogène est donc produit au cours de la combustion.

Si l'on compare l'épaisseur au niveau de la flamme sur l'axe Y , celle-ci est bien plus importante lorsque la flamme rencontre un mélange dilué en gaz brûlés.

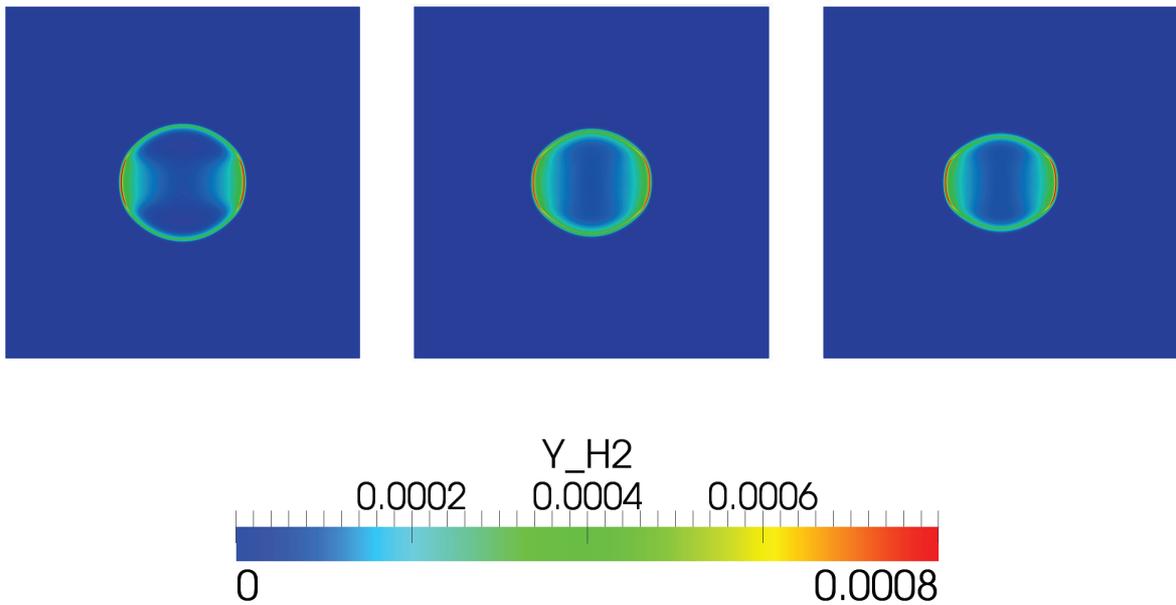


Fig 6.9 – Champs de fraction massique du dihydrogène. Gauche : cas $D4_Z$. Milieu : cas $D4_{EGR}$. Droite : cas $D7_{EGR}$. Carré de 8 cm de côté.

L'évolution du profil de température le long de l'axe Y du côté positif est observée pour les cas $D4_{EGR}$ et $D4_Z$, figure 6.10.

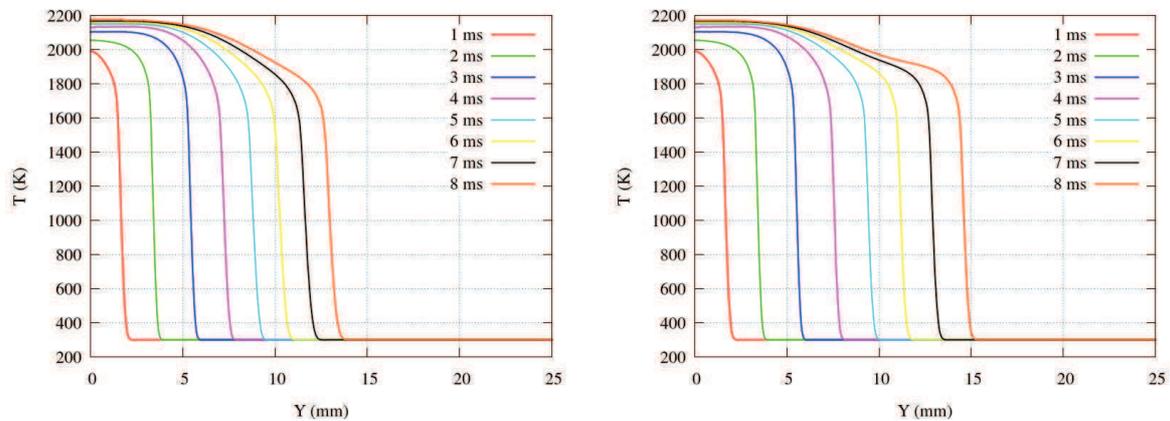


Fig 6.10 – Evolution temporelle de la température le long de l'axe Y positif. Gauche : cas $D4_{EGR}$. Droite : cas $D4_Z$.

Sur cette figure, on peut noter que tout comme sur l'axe X , la flamme rencontrant une stratification en gaz frais possède un diamètre supérieur à la flamme rencontrant un mélange dilué en gaz brûlés. Cela se voit à partir de $t = 5$ ms, c'est-à-dire quand la flamme rencontre le mélange dilué ou plus pauvre.

A partir de $t = 6$ ms, les profils de température des cas $D4_{EGR}$ et $D4_Z$ entre le centre du noyau, $Y = 0$ mm et le front de flamme (où règne un fort gradient de température) sont différents.

De plus, la température de fin de combustion est supérieure pour le cas $D4_Z$, ce qui corrobore le fait que la flamme est plus rapide.

6.4.3 Vitesses de flamme

L'évolution temporelle de la vitesse absolue des deux cas observés, $D4_{EGR}$ et $D4_Z$, est tracée sur la figure 6.11.

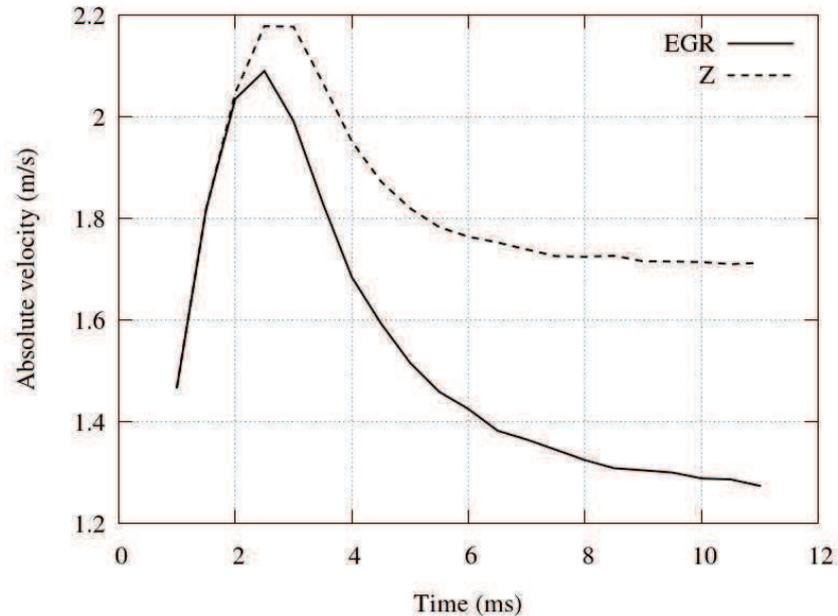


Fig 6.11 – Evolution temporelle de la vitesse absolue le long de l'axe Y positif pour le cas $D4$, rencontrant un mélange dilué en gaz brûlés ou un mélange de gaz frais plus pauvre.

La flamme évoluant au départ dans le même milieu homogène non dilué de richesse $\varphi = 0.95$, il est normal de voir les courbes se superposer durant les premières milli-secondes. Les comportements de la vitesse absolue des deux flammes se distinguent après 2 ms. La flamme évoluant dans un milieu stratifié en gaz frais est plus rapide que celle évoluant dans un milieu stratifié par une dilution en gaz brûlés. Cette évolution était attendue suite aux premières analyses effectuées.

A $t = 7$ ms, le ratio de vitesse absolue entre le cas $D4_Z$ et le cas $D4_{EGR}$ est égal à 1.27.

La vitesse laminaire est calculée de la même manière que dans le chapitre 4, c'est-à-dire en prenant la vitesse et la densité correspondant à $C = 0.73$,

$$s_L = \frac{\rho_{C=0.73}}{\rho_u} (s_a - u_{C=0.73}), \quad (6.2)$$

où l'indice u fait référence aux gaz frais (unburnt).

L'évolution en temps de s_L est tracée sur la figure 6.12.

Le comportement de la vitesse laminaire est similaire à celui de la vitesse absolue. Les courbes sont superposées durant les premières milli-secondes puis diffèrent lors de la rencontre avec le mélange plus pauvre ou dilué. Les courbes ont l'air de tendre vers une asymptote. Celle-ci semble plus rapidement atteinte dans le cas présentant une stratification en gaz frais.

Le temps de relaxation théorique est maintenant calculé. Plutôt que de le baser sur la fraction de mélange, comme cela était fait à présent, il est ici basé sur la fraction massique de propane. En effet, lors d'une dilution en gaz brûlés, la fraction de mélange reste constante dans tout le domaine puisqu'elle est basée sur la conservation des atomes. Les cas ayant été créés de telle sorte que leur champ de fraction massique de propane initial soient les mêmes, il paraît plus judicieux de prendre ce critère.

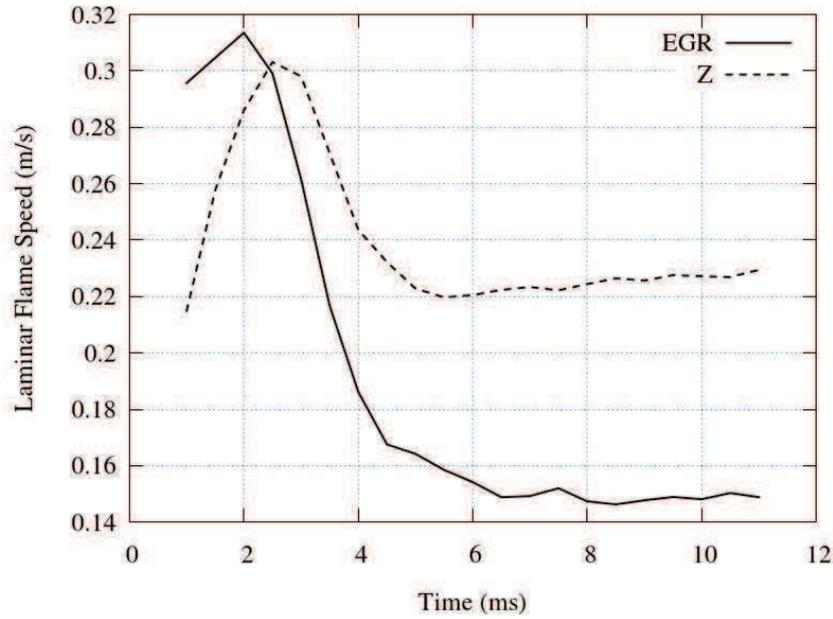


Fig 6.12 – Evolution temporelle de la vitesse laminaire le long de l'axe Y positif pour le cas $D4$, rencontrant un mélange dilué en gaz brûlés ou un mélange de gaz frais plus pauvre.

L'épaisseur du gradient de stratification, $\delta_{Y_{C_3H_8}}$, est la même pour les cas $D4_{EGR}$ et $D4_Z$,

$$\delta_{Y_{C_3H_8}} = \frac{Y_{C_3H_8,max} - Y_{C_3H_8,min}}{|\nabla Y_{C_3H_8}|_{max}}, \quad (6.3)$$

et vaut ici $\delta_{Y_{C_3H_8}} = 428.38 \mu\text{m}$.

La différence entre les deux cas réside dans la vitesse laminaire du mélange dilué et du mélange le plus pauvre. La flamme $1D$ en propagation libre réalisée avec Cantera donne une vitesse laminaire égale à $s_L = 17.09 \text{ cm/s}$ pour le mélange dilué en gaz brûlés, ce qui amène à un temps de relaxation de $\tau = 2.51 \text{ ms}$. Pour le mélange de richesse $\varphi = 0.75$ la vitesse laminaire trouvée est plus rapide, $s_L = 24.93 \text{ cm/s}$, ce qui implique un temps de relaxation plus court, $\tau = 1.72 \text{ ms}$. Les temps calculés numériquement sont plus longs que les temps théoriques, d'environ 3.5 ms pour le cas $D4_{EGR}$ et 2 ms pour le cas $D4_Z$.

6.4.4 Dynamique dans les gaz brûlés

La dynamique observée dans les gaz brûlés des cas stratifiés présentés dans le chapitre 4 se produit aussi pour une combustion avec dilution par des gaz brûlés. Cela laisse à penser que le même type de dynamique que celui observé dans les cas stratifiés en gaz frais à lieu dans les gaz brûlés. Des lignes de courant vont du mélange le plus riche vers le mélange contenant des gaz brûlés et empêchent ainsi la flamme de se propager à sa vitesse normale.

Le modèle proposé dans la section 4.5.7 est appliqué aux cas $D4_{EGR}$ et $D4_Z$ au temps $t = 10 \text{ ms}$.

Tout comme pour le temps de relaxation théorique, la valeur de coupure entre le mélange "rapide" et le mélange "lent" est basée sur la fraction massique de propane. La valeur de coupure est déterminée pour correspondre à la valeur $\varphi = 0.65$ du cas $C3$, c'est-à-dire 14.2% de l'écart entre la fraction massique de propane au point 1 et celle au point 2.

Un récapitulatif des résultats obtenus est donné dans le tableau 6.2.

Le modèle marche relativement bien pour le cas $D4_{EGR}$ mais présente de plus grandes erreurs dans le cas $D4_Z$. Dans le cas $D4_{EGR}$, la différence entre la vitesse laminaire du mélange non

	Cas	$s_{a,f}$	$s_{a,s}$	$u_{bg,f}$	$u_{bg,s}$
Modèle	$D4_{EGR}$	1.90	1.33	-0.84	0.18
	$D4_Z$	2.60	1.57	-0.12	0.03
Mesuré	$D4_{EGR}$	1.76	1.29	-0.81	0.40
	$D4_Z$	2.02	1.71	-0.57	0.26

Tableau 6.2 – Récapitulatif des valeurs trouvées par le modèle et mesurées pour les cas $D4_{EGR}$ et $D4_Z$ au temps $t = 10$ ms. L'indice f correspond au point "rapide" et l'indice s au point "lent".

dilué et du mélange dilué est assez grande. La flamme est plus asymétrique et le modèle est plus efficace. Dans le cas $D4_Z$, les vitesses laminaires au point 1 et au point 2 sont plus proches, respectivement $s_L = 37.53$ cm/s et $s_L = 24.93$ cm/s d'après Cantera. La dynamique dans les gaz brûlés est moins forte et le modèle a plus de mal à prédire les bonnes vitesses dans les gaz brûlés.

Il s'agit d'un modèle simplifié comportant des hypothèses fortes. Les effets instationnaires ne sont pas pris en considération. Lorsque les mélanges rencontrés par la flamme sont plus proches, l'établissement de la dynamique prend plus de temps. La valeur de coupure devient aussi plus difficile à déterminer.

6.5 Flamme établie rencontrant des EGR

Une dernière étude différant de celles présentées jusqu'à présent a été réalisée. Le domaine et le maillage présentés précédemment sont conservés pour cette étude mais les champs initiaux sont modifiés.

Au départ, le domaine est rempli d'un mélange propane/air de richesse $\varphi = 0.8$. La procédure d'initialisation du noyau de gaz brûlés présentée dans la section 4.3.2 est répétée. Seule une simulation en chimie complexe est observée ici, par conséquent $t = 0$ ms correspond au début de la simulation. Une fois le noyau et les termes sources établis, des gaz brûlés sont insérés dans le domaine, à $t = 1$ ms.

Ces gaz sont introduits dans une bande de 2 mm d'épaisseur. Celle-ci est située entre 5 et 7 mm par rapport au centre du domaine. Les gaz sont à la température des gaz frais soit $T = 300$ K. Dans ce cas, la flamme ne rencontre pas un mélange dilué, elle s'oppose directement à un mélange froid non inflammable.

L'évolution temporelle de la fraction massique de propane est donnée sur la figure 6.13.

Deux choses sont visibles sur cette figure. Tout d'abord, la diffusion des gaz brûlés est observable. En effet, à l'introduction des gaz, le gradient entre la bande de gaz brûlés et les gaz frais est très raide. Au fur et à mesure, ce gradient s'épaissit à cause de la diffusion des gaz. La séparation gaz frais/gaz brûlés ne se maintient pas de manière naturelle.

D'autre part, la flamme déforme le gradient de gaz brûlés. Le noyau de gaz brûlés chauds pousse les gaz frais qui sont présents autour de lui et retarde ainsi la rencontre avec la bande de gaz brûlés. Jusqu'à $t = 6$ ms, la forme cylindrique de la flamme ne semble pas être affectée par la bande de gaz brûlés.

Afin d'analyser l'impact de la bande de gaz brûlés sur la flamme, le terme source du propane est observé, de 1 à 11 ms par pas de 2 ms. Il est tracé sur la figure 6.14.

Même si la flamme ne semble pas être déformée, la bande de gaz brûlés froids influe sur la

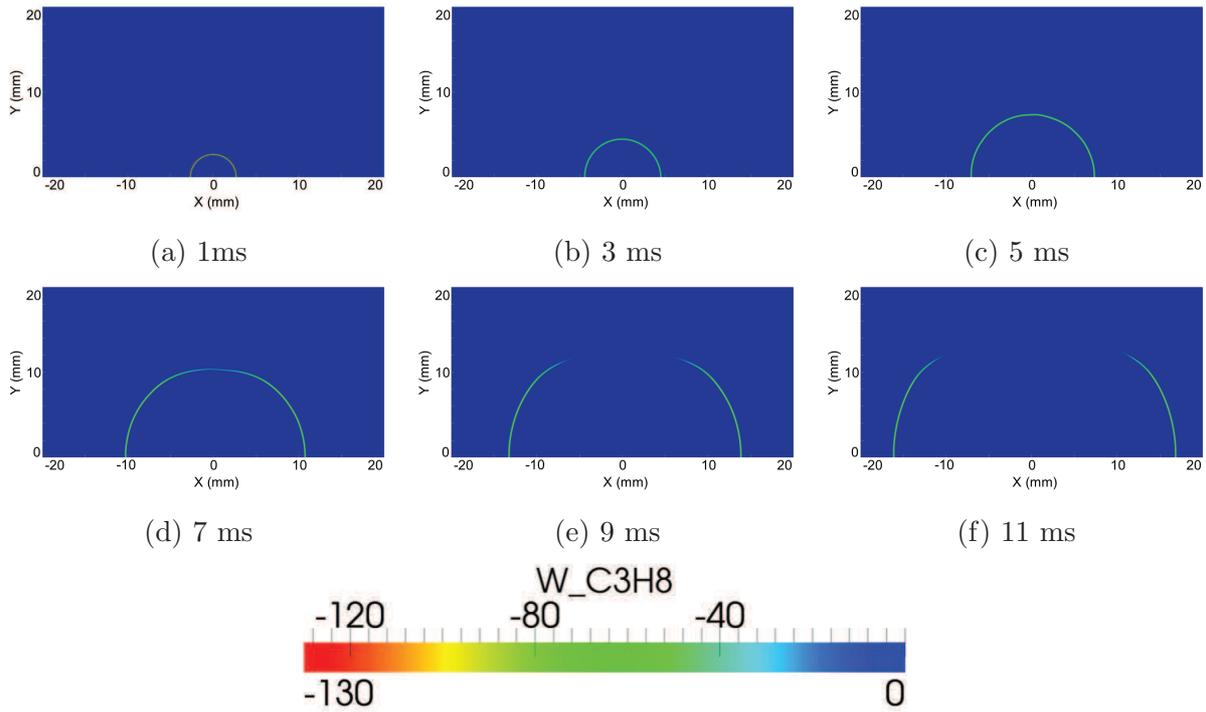


Fig 6.14 – Champs du terme source de propane. Flamme établie rencontrant un gradient de gaz brûlés.

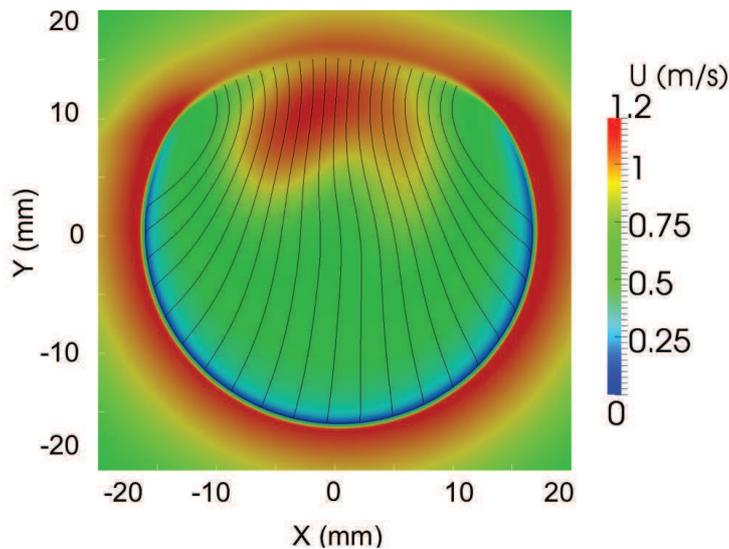


Fig 6.15 – Champ de vitesse à $t = 11$ ms. Les lignes de courant présentes dans les gaz brûlés ont été tracées.

mogène. Le mouvement s'instaure pour contrer la difficulté qu'éprouve la flamme lors de sa rencontre avec le gradient de gaz brûlés. Le mouvement est moins symétrique que dans les cas stratifiés sans vitesse initiale étudiés dans le chapitre 4.

6.6 Conclusion

Dans un premier temps, des simulations homogènes de gaz frais dilués par des gaz brûlés ont été réalisées. Celles-ci ont permis d'approcher la limite d'inflammabilité d'un mélange pro-

pane/air dilué par des gaz brûlés. Cette limite se situe autour de $\tau_{EGR} = 25\%$.

Nous avons aussi vu qu'allumer le noyau initial dans un milieu non dilué permettait d'augmenter cette limite d'inflammabilité et d'atteindre des mélanges dilués à $\tau_{EGR} = 50\%$. Tout comme dans le chapitre 4, la difficulté d'allumage du mélange fortement dilué provient du fort taux d'étirement ainsi que des pertes thermiques importantes durant les premières milli-secondes. Une fois ces premières milli-secondes écoulées, de tels mélanges sont inflammables.

Une comparaison entre une stratification par une dilution en gaz brûlés et une stratification en richesse sans dilution a été effectuée. Nous avons vu que pour une même fraction massique de propane, la vitesse laminaire du mélange composé de gaz frais est plus rapide que la vitesse laminaire du mélange dilué par des gaz brûlés. Par conséquent, la flamme stratifiée par un mélange de gaz frais non dilué est moins asymétrique et plus grande (en rayon) que la flamme stratifiée par un mélange dilué en gaz brûlés.

Pour finir, une flamme établie rencontrant des EGR est analysée. Nous avons vu que la flamme modifie la forme du gradient de gaz brûlés mais que ce dernier impacte fortement la flamme puisqu'il entraîne une extinction locale de cette dernière. En outre, même si la flamme évolue en milieu homogène, un mouvement de fluide dans les gaz brûlés commence à se distinguer et tend à s'opposer à l'extinction locale.

Les travaux présentés ici ont conduit à des analyses non triviales, mais les conclusions sont encore à considérer avec précaution si l'on cherche à étudier l'influence des gaz brûlés au sein d'une chambre de combustion d'un moteur. En effet, toutes les simulations sont réalisées avec un mélange propane/air. Les caractéristiques du propane sont sensiblement différentes de celles des carburants utilisés dans les moteurs. Il est possible que le comportement qualitatif de la flamme soit similaire mais les valeurs numériques ne peuvent pas être utilisées comme des références pour des simulations ou des expériences avec un autre carburant.

Sommaire

7.1 Conclusions	193
7.2 Perspectives	195

7.1 Conclusions

La combustion se produisant dans un moteur automobile est un phénomène complexe. En effet, des mélanges de composition et de température variables sont présents au sein de la chambre de combustion. La flamme rencontre des hétérogénéités qui altèrent sa propagation. A ce phénomène se greffe l'effet de la turbulence qui modifie notablement le comportement de la flamme. Afin de mieux dimensionner les chambres de combustion ainsi que d'avoir une meilleure compréhension sur la manière d'établir le mélange, il paraît nécessaire d'analyser chaque phénomène séparément pour comprendre leur influence. Cette thèse s'inscrivait dans ce sens puisque le but était d'étudier le développement d'une flamme rencontrant un gradient de concentration (en gaz frais ou en gaz dilués par des EGR). Pour comprendre chaque effet, il a été décidé d'observer tout d'abord des cas simples laminaires puis d'enrichir l'étude en reproduisant une expérience de combustion stratifiée turbulente.

La réalisation de cas simples et contrôlés est rendue possible par la simulation numérique. Afin de bien capter les différents phénomènes, des simulations aux grandes échelles ont été réalisées avec le code YALES2. La problématique de la stratification a entraîné des modifications du code en terme de modélisation de la cinétique chimique. En effet, la chimie tabulée par la méthode PCM-FPI utilisée dans le code YALES2 jusqu'à présent ne permettait pas de répondre à l'ensemble des cas à traiter. Un second modèle, nommé chimie détaillée, a été implanté dans le code de calcul.

La chimie détaillée est connue pour être coûteuse en terme de temps CPU. La taille du domaine, la durée et le nombre de calculs à réaliser ont été des facteurs limitants. Par conséquent, seules des simulations 2D ont été effectuées avec ce modèle de cinétique chimique.

Les carburants utilisés dans les moteurs à combustion ayant des formulations relativement complexes, il a été décidé ici de travailler avec un hydrocarbure plus simple. Le propane étant connu pour reproduire un certain nombre de caractéristiques des carburants moteur, celui-ci a été choisi pour l'ensemble des simulations. Un séjour de trois mois à l'Université de Cornell (USA) a permis la réalisation d'un nouveau mécanisme semi-détaillé pour la combustion propane/air en collaboration avec le Prof. P. Pepiot. Ce schéma est basé sur des flammes planes prémélangées en propagation libre dans un milieu laminaire. Il est validé dans la gamme de richesse $0.6 \leq \varphi \leq 1.2$. Le critère principal lors de la réduction du schéma détaillé est la conservation de la vitesse laminaire de flamme. Le phénomène d'auto-allumage ne faisait pas partie des cibles de ce mécanisme et n'a pas été validé dans ces travaux.

Les premières simulations de flammes stratifiées en milieu laminaire ont mis en évidence un mouvement au sein des gaz brûlés. Ce mouvement n'est pas présent dans des flammes homogènes et explique la modération de l'asymétrie. Dans le noyau de gaz brûlés, le fluide se déplace des gaz dont la composition est proche de la stoechiométrie vers les gaz pauvres ou riches possédant des vitesses laminaires plus faibles. Les conditions des gaz brûlés au niveau du front de flamme le plus lent sont alors modifiées. De plus, des mélanges ne pouvant pas être allumés en milieu homogène sont atteignables grâce à un allumage dans un mélange plus riche. Un modèle simplifié permettant de lier la vitesse absolue de la flamme côté rapide et côté lent avec le rapport de surface rapide/lent a été établi. De ce fait, il est maintenant possible d'estimer les vitesses au sein des gaz brûlés. Ces simulations ont aussi montré la capacité du modèle de chimie tabulée FPI à reproduire le comportement de flammes stratifiées.

Cette conclusion a permis d'utiliser la méthode PCM-FPI pour la réalisation de simulations 3D de flammes stratifiées en milieu turbulent. Ces simulations représentaient un véritable défi car il s'agissait ici de reproduire une injection instationnaire menant à la réalisation d'un mélange stratifié [11]. De plus, la propagation d'une flamme dans un domaine fermé devait être analysée. Le bon jeu de paramètres pour la turbulence ainsi qu'une méthode pour augmenter temporellement la pression ont dû être identifiés. Une méthode permettant de mesurer la vitesse laminaire de flamme étirée a été proposée. Celle-ci est basée sur le suivi d'un iso-contour de la variable de progrès et la prise en considération d'un rapport de densité local. L'influence de la courbure sur la vitesse de flamme a aussi été montrée. Même si la chimie tabulée semble répondre de façon incorrecte à de forts taux de courbure, elle est capable de reproduire en partie le comportement de flammes stratifiées turbulentes. La dynamique dans les gaz brûlés a ensuite été observée grâce au modèle trouvé précédemment. Un mouvement au sein des gaz brûlés ne peut plus clairement être détecté à cause de la turbulence et de la vitesse du fluide, cependant, comme dans les cas laminaires, une homogénéisation de l'impulsion le long du front de flamme semble se réaliser. L'analyse de la flamme à l'aide des harmoniques sphériques a permis de montrer que les déformations de la flamme étaient corrélées à la vitesse absolue. La limitation de la chimie tabulée réside par contre dans sa capacité à simuler des mélanges de température ou de compositions variables.

Par conséquent, la chimie détaillée a été réutilisée dans la dernière partie de cette thèse pour traiter la problématique de flammes rencontrant des mélanges dilués en gaz brûlés. Les travaux réalisés en stratification laminaire et turbulente ont permis de valider certains outils et de développer des modèles pouvant s'appliquer à de telles situations. Seuls des gaz brûlés froids ont été étudiés dans cette partie. A partir d'un certain taux de dilution, il a été montré que le mélange n'était plus inflammable en milieu homogène. Du point de vue moteur automobile, ce taux déterminé avec le propane est à prendre avec précaution puisqu'il dépend du carburant utilisé. Les conclusions et observations faites sur les flammes stratifiées se propageant dans un milieu laminaire semblent s'appliquer à des flammes rencontrant des mélanges dilués en gaz brûlés. Tout d'abord l'élargissement des limites d'inflammabilité. Il a été trouvé que la difficulté d'allumage des mélanges proches de la limite d'inflammabilité été due au trop fort taux d'étirement. Cette difficulté peut être surmontée en allumant le noyau initial dans un mélange inflammable (non dilué) puis en le faisant se propager dans des milieux plus dilués. La limite d'inflammabilité passe ainsi de $\tau_{EGR} = 25\%$ pour une combustion homogène dans un mélange dilué à au moins $\tau_{EGR} = 50\%$ pour une combustion allumée dans un milieu non dilué puis rencontrant une dilution en gaz brûlés. Une comparaison entre une propagation dans un milieu stratifié en richesse et une propagation dans un milieu stratifié par une dilution en gaz brûlés a été réalisée. Pour une même fraction massique de propane, la flamme stratifiée par un mélange de gaz frais est moins asymétrique et plus grande, du fait de sa vitesse laminaire

plus élevée que le mélange équivalent avec dilution en gaz brûlés. Une dernière étude montrant une flamme établie rencontrant un gradient de gaz brûlés est effectuée. Dans une telle situation, la flamme déforme la bande de gaz brûlés qu'elle rencontre. La bande de gaz brûlés joue aussi un rôle puisqu'une extinction locale de la flamme se produit. Un mouvement au sein des gaz brûlés semble se créer pour s'opposer à cette extinction locale. Des études plus poussées sont nécessaires à la compréhension de la propagation du front de flamme dans de tels milieux.

Du point de vue industriel, des informations ont été apportées pour améliorer la forme de la chambre de combustion ainsi que la façon dont le mélange doit être réalisé au sein de celle-ci. Afin d'avoir une combustion de meilleure qualité, et par conséquent, un meilleur rendement, le mélange devrait être réalisé de manière stratifiée avec un allumage dans la partie riche. Le type d'injecteur devient alors crucial. En outre, la dynamique présente au sein des gaz brûlés modifie la vitesse du fluide dans les gaz frais. Cette modification a d'autant plus d'impact en milieu confiné où la vitesse du fluide est modifiée par la présence des parois. Des informations concernant l'utilisation des EGR ont aussi été apportées.

7.2 Perspectives

Les études présentées ont mené à des conclusions intéressantes à la fois du point de vue purement scientifique que du point de vue industriel. Ces conclusions ouvrent la porte d'un champ d'investigations futures.

L'implantation de la chimie détaillée a en effet présenté nombre de difficultés. La principale résidait dans l'intégration des termes sources chimiques. Une méthode permettant de mieux répartir le calcul de ceux-ci a été mise au point, et est présentée en annexe C. Cependant, aucun modèle de sous-maille n'est encore appliqué ce qui restreint la taille des mailles du domaine. Il pourrait être envisageable d'implanter des modèles tels que celui des flammes épaissies afin de gagner du temps de calcul et de pouvoir réaliser des simulations en trois dimensions. Une attention particulière devra être portée à la validation d'un tel modèle puisque celui-ci modifiera les espèces intermédiaire. Son champ de validité devra donc être vérifié.

Le modèle présenté dans le chapitre 4 pour prédire la dynamique des gaz brûlés est un modèle simplifié. Il serait intéressant d'aborder le caractère instationnaire de la flamme ainsi que d'évaluer de manière plus précise l'influence du degré de stratification sur les caractéristiques de la flamme. En outre, lorsqu'aucune stratification n'est présente, aucune dynamique n'est observée dans les gaz brûlés. Il serait intéressant de trouver les limites asymptotiques du modèle quant à cette dynamique.

L'effet mémoire trouvé à la fois dans les expériences [153, 11] et dans les simulations numériques [44] mériterait d'être approfondi. En effet, les techniques expérimentales ne permettent pas de déterminer la richesse sur le front de flamme. Celle-ci est mesurée légèrement en amont du front de flamme ce qui peut conduire à un biais au niveau des conclusions. La flamme peut en effet être considérée plus riche ou plus pauvre qu'elle ne l'est réellement. Du point de vue numérique, Pires da Cruz *et al.* [44] mesurent la richesse au niveau du dégagement de chaleur maximal. Cependant, la diffusion différentielle des espèces induit un gradient de la fraction de mélange et par conséquent de la richesse au niveau du front de flamme. Une étude de l'influence de l'endroit où est mesurée la richesse sur les résultats semble constituer une piste envisageable pour mieux caractériser l'effet mémoire.

Le chapitre 6 ne présente qu'une ébauche des études possibles prenant en compte les gaz brûlés. Des études similaires où seule la température des gaz brûlés serait modifiée seraient les

bienvenues. L'effet des gaz résiduels chauds présents au sein d'un moteur à combustion n'a pu être abordé dans ces travaux de thèse.

De même, les études présentées dans ces travaux ne montrent que des stratifications structurées. Les hétérogénéités présentes dans une chambre de combustion moteur réelle présentent un caractère bien plus aléatoire [137]. La réponse de la flamme sera susceptible d'être sensiblement modifiée.

La mise en place de la chimie complexe peut aussi permettre une analyse du comportement de la flamme en fonction de la composition des gaz brûlés. En effet, dans cette thèse, la composition des gaz brûlés a été prise comme la composition d'équilibre d'un mélange à une certaine richesse. La composition des gaz diluants peut être facilement modifiée afin d'étudier la modification du comportement du front de flamme en fonction de celle-ci.

Liste des illustrations

1.1	Cycle à 4 temps d'un moteur à allumage commandé, extrait de [64].	18
1.2	Modes opérationnels d'un moteur à charge stratifiée, extrait de [167].	22
1.3	Systèmes d'injection, extrait de [152].	23
1.4	Principe de fonctionnement de la vanne EGR.	24
1.5	Formation de la recirculation interne de gaz, extrait de [43].	24
2.1	Schématisation d'une flamme triple, extrait de [165].	28
2.2	Représentation de la propagation d'une flamme turbulente dans un milieu hétérogène, tiré de [80].	30
2.3	Corrélation entre l'épaisseur de flamme locale et la fraction massique maximale de méthane. Différentes stratifications sont étudiées et comparées à des cas homogènes. A la stœchiométrie, $\chi_{CH_4} = 0.06$. Extrait de [46].	31
2.4	Dispositif expérimental extrait de [8]. Schéma de la réalisation de la stratification.	32
2.5	Distribution spatiale de richesse initiale pour les différentes configurations étudiées, tiré de [87]. L'échelle va du blanc, correspondant à une richesse nulle, au noir, équivalent à une richesse égale à 2. La fine ligne noire représente la ligne stœchiométrique et les lignes verticales indiquent la position de la flamme laminaire initiale.	34
2.6	Schéma du brûleur stratifié swirlé, tiré de [179].	35
2.7	Vitesses instantanées (flèches) et richesse (couleur) au niveau du front de flamme à différents instants après l'allumage, extrait de [133].	36
2.8	Evolution de la vitesse laminaire de flamme non étirée. Cas 1 : $\phi = 1.24$ à 0.6 , Cas 2 : $\phi = 0.95$ à 0.6 , Cas 3 : $\phi = 0.8$ à 0.6 , d'après [11].	37
2.9	Dispositif expérimental pour l'étude de la combustion stratifiée, extrait de [91].	38
2.10	Comparaison de la vitesse laminaire entre des flammes homogènes et une flamme hétérogène passant de la stœchiométrie à la richesse $\phi = 0.35$, extrait de [44].	39
2.11	Schéma d'une flamme stratifiée à contre courant, extrait de [207].	40
2.12	Représentation des deux concepts permettant la stratification EGR. Haut : concept "Corndog". Bas : Concept des vortex conjugués. Les parties grisées comportent des EGR tandis que les parties blanches sont composée d'un mélange frais air/carburant.	43
2.13	Schéma du piston à deux étages, de la stratification et du spray souhaités, extrait de [38].	44
2.14	Stratification en EGR présente dans le cylindre en fonction de l'injection, extrait de [38]. a : configuration LS-EGR, les EGR arrivent par le conduit tangentiel. b : configuration RS-EGR, les EGR arrivent par le conduit hélicoïdal.	45

2.15	Propagation d'une flamme laminaire dans un milieu de température hétérogène, extrait de [137].	46
3.1	Exemple d'une variété ILDM pour une combustion $CO/H_2/air$, et de différentes trajectoires chimiques dans l'espace H_2O, CO_2 . Extrait de Maas et Pope [111]. . .	67
3.2	Principe de la méthode de tabulation FPI. Calcul de flammes 1D laminaires, puis mise en données sous forme de tables. Représentation $T = f(Z, C)$ pour une table comprenant 80 flammelettes.	69
3.3	Principe de la cascade énergétique, extrait de [155].	71
3.4	Représentation des trois niveaux de résolution des équations de Navier-Stokes, extrait de Roux [163].	72
3.5	Diagramme de combustion prémélangée turbulente proposé par Peters [141]. . .	76
3.6	Schéma des vitesses de flamme, extrait de [149].	78
3.7	Schéma d'une flamme plane laminaire ayant une vitesse d'entrée u_1	79
3.8	Schéma d'une flamme sphérique en expansion à pression constante. $r(t)$ est le rayon au niveau du front de flamme. Extrait de [149].	80
3.9	Schéma d'une flamme de prémélange turbulente se propageant dans un conduit avec une vitesse de fluide constante, extrait de [142].	82
4.1	Schéma typique d'un DRG montrant les relations existantes entre les espèces. . .	88
4.2	Partie d'un DRG. Enlever C introduirait moins d'erreur sur A qu'enlever D bien que les espèces ne soient pas directement liées entre elles, extrait de [136].	89
4.3	Comparaison des profils des espèces majoritaires obtenus avec le schéma détaillé, traits pleins, et le schéma réduit, traits pointillés, pour la flamme stœchiométrique. 91	91
4.4	Vitesse laminaire, s_L , en fonction de la richesse pour des flammes propane/air à température et pression standards. Comparaison entre données expérimentales (symboles) et résultats numériques avec le schéma détaillé, ligne continue, et le schéma réduit, ligne pointillée.	92
4.5	Profils des espèces majoritaires obtenus pour une discrétisation spatiale de $40 \mu m$ avec différents CFL.	94
4.6	Profils des espèces majoritaires obtenus avec un CFL égal à 0.1 pour différentes discrétisations spatiales.	94
4.7	Profils des espèces majoritaires obtenus avec une discrétisation spatiale de $40 \mu m$, un CFL égal à 0.1 calculé avec une diffusion implicite ou explicite.	95
4.8	Température en fonction de la variable de progrès $Y_C = Y_{CO} + Y_{CO_2}$, pour une richesse pauvre et une richesse riche. Un point de rebroussement est visible pour le mélange riche.	96
4.9	Flamme 1D de richesse $\varphi = 1.25$. Température en fonction de la variable de progrès Y_C , pour deux définitions de Y_C . Lorsque H_2O est inclus dans la définition de Y_C , Y_C est bien monotone.	96
4.10	Tabulation de la température en fonction de la variable de progrès et de la fraction de mélange.	97
4.11	Profils initiaux de richesse pour les différents cas.	100
4.12	Evolution temporelle des principales fractions massiques pour le cas C3. Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.	101
4.13	Evolution temporelle des principales fractions massiques pour le cas C4. Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.	102
4.14	Fraction finale de CO_2 en fonction de la richesse.	103

4.15	Evolution temporelle de la fraction massique maximale de propane pour les cas <i>C3</i> et <i>C4</i> réalisés avec les deux modèles de chimie.	104
4.16	Evolution temporelle de la vitesse laminaire de flamme pour les cas <i>C3</i> et <i>C4</i> , réalisés avec les deux modèles de chimie.	105
4.17	Densité de maillage du cas <i>2D</i> . L'endroit où la flamme se propage est maillé plus finement.	107
4.18	Cas <i>C3</i> : champ de richesse à $t = 0$ ms. Le disque bleu foncé dans la bande rouge représente le noyau de gaz brûlés initial.	108
4.19	Evolution temporelle du contour de flamme pour le cas <i>C1</i> en chimie tabulée. Le contour de flamme est tracé à chaque milli-seconde, de 1 à 10 ms.	109
4.20	Champs de fraction massique du propane aux trois premières milli-secondes. Cas <i>C3</i> , réalisé en chimie complexe. Carré de 8 cm de côté.	109
4.21	Evolution temporelle du contour de flamme pour le cas <i>C3</i> en chimie tabulée. Le contour de flamme est tracé à chaque milli-seconde, de 1 à 10 ms.	110
4.22	Coefficient d'asymétrie pour les cas <i>C3</i> et <i>C4</i> . Haut : chimie complexe. Bas : chimie tabulée.	111
4.23	L_y en fonction de L_x lorsque la flamme a commencé à se développer pour les cas <i>C3</i> et <i>C4</i> avec les deux modèles de chimie.	112
4.24	Evolution temporelle de la fraction massique de H_2 de 2 à 10 ms, par pas de 2 ms pour le cas <i>C4</i> . Carré de 8 cm de côté. Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.	113
4.25	Champ du terme source de H_2 saturé pour le cas <i>C4</i> à $t = 10$ ms, avec un schéma de la localisation des flammes triples (lignes blanches). Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.	114
4.26	Champ du gradient de la fraction de mélange pour le cas <i>C4</i> à $t = 6$ ms. Carré de 8 cm de côté. Gauche : chimie complexe. Droite : chimie tabulée.	115
4.27	Evolution temporelle de la fraction massique du propane en chimie complexe pour le cas <i>C3</i> . Gauche : <i>1D</i> . Droite : <i>2D</i>	115
4.28	Localisation des points où les vitesses de flamme sont étudiées.	116
4.29	Comparaison de l'évolution temporelle de la vitesse absolue au point 2 pour les cas <i>C2</i> et <i>C3</i> , chimie tabulée.	117
4.30	Evolution de la vitesse absolue aux points étudiés pour les cas <i>C3</i> et <i>C4</i> résolus avec les deux modèles de chimie. Haut : point 1. Bas : point 2.	118
4.31	Schéma des profils de la variable de progrès, de la vitesse du fluide et de la densité le long de l'axe Y positif.	119
4.32	Evolution temporelle de la vitesse laminaire de flamme pour le cas <i>C2</i> , réalisé avec les deux modèles de chimie.	119
4.33	Evolution temporelle de la vitesse laminaire de flamme pour les cas <i>C3</i> et <i>C4</i> au point 1, réalisé avec les deux modèles de chimie.	120
4.34	Vitesse laminaire de flamme en fonction de l'étirement pour le cas <i>C2</i> , réalisé avec les deux modèles de chimie.	121
4.35	Vitesse laminaire de flamme en fonction de l'étirement au point 2, pour le cas <i>C3</i> , résolu avec les deux modèles de chimie.	122
4.36	Champ de vitesse instantanée pour le cas <i>C3</i> , réalisé en chimie tabulée. Les lignes de courant présentes dans les gaz brûlés sont représentées. Carré de 8 cm de côté.	123
4.37	Evolution temporelle de la vitesse des gaz frais et brûlés aux points 1 et 2 pour le cas <i>C3</i> , réalisé en chimie tabulée. L'indice fg correspond aux gaz frais et bg aux gaz brûlés.	124

4.38	Schéma du profil de vitesse le long de l'axe X pour une flamme stratifiée. Représentation des points u_{fg} et u_{bg} où les vitesses des gaz frais et des gaz brûlés sont mesurées.	124
4.39	Evolution temporelle des contours de flamme coloriés par la richesse pour le cas $C3$ réalisé en chimie tabulée. Le contour est tracé à chaque milli-seconde, de 6 à 11 ms. L'iso-richesse $\varphi = 0.7$ est tracée en pointillé.	125
4.40	Schéma d'un tube de courant présent dans les gaz brûlés.	126
4.41	Comparaison de la vitesse absolue mesurée avec les vitesses absolues calculées à partir du modèle. Deux valeurs de transition de surface sont analysées. Cas $C3$ réalisé avec la chimie complexe.	128
4.42	Comparaison de la vitesse absolue mesurée avec les vitesses absolues calculées à partir du modèle. Deux valeurs de transition de surface sont analysées. Cas $C3$ réalisé avec la chimie tabulée.	128
4.43	Profil de vitesse axiale le long de l'axe Y pour le cas $C5$.	129
4.44	Champ de vitesse du fluide lorsque la flamme est établie, simulation réalisée en chimie complexe. Carré de 8 cm de côté. Gauche : cas $C3$. Droite : cas $C5$.	130
4.45	Champ de vitesse du fluide, cas $C5$. Gauche : numérique, chimie complexe. Droite : expérimental, extrait de [11].	130
4.46	Coefficient d'asymétrie en fonction du temps, basé sur un rayon équivalent pour les cas $C3$ et $C5$, réalisés en chimie complexe et en chimie tabulée. Comparaison avec les données expérimentales.	131
4.47	Evolution temporelle de la vitesse laminaire au point 2 pour le cas $C5$, réalisé avec les deux modèles de chimie. Comparaison avec les données expérimentales.	132
4.48	Profil de richesse sur l'axe Y au moment de l'allumage pour le cas $C3$ avec différentes épaisseurs.	132
4.49	Evolution de la vitesse absolue au point 1 pour différentes épaisseurs de gradient de stratification pour le cas $C3$, chimie complexe.	133
4.50	Evolution de la vitesse absolue au point 2 pour différentes épaisseurs de gradient de stratification pour le cas $C3$, chimie complexe.	133
4.51	Evolution de la vitesse laminaire au point 1 pour différentes épaisseurs de gradient de stratification pour le cas $C3$, chimie complexe.	134
4.52	Evolution de la vitesse laminaire au point 2 pour différentes épaisseurs de gradient de stratification pour le cas $C3$, chimie complexe.	135
5.1	Schéma de la configuration expérimentale et de la fenêtre d'observation, extrait de [11].	138
5.2	Schéma de la décomposition du domaine pour le maillage.	140
5.3	Densité du maillage raffiné dans le plan XY .	141
5.4	Rapport de la viscosité turbulente sur la viscosité moléculaire dans la fenêtre de visualisation. Gauche : au moment de l'allumage. Droite : 5 ms après l'allumage. Maillage à 304 millions d'éléments.	142
5.5	Evolution de la vitesse maximale en sortie de l'injecteur.	142
5.6	Simulation de la phase d'injection avec le maillage 38 millions. Contour de la richesse φ , avec une augmentation linéaire de pression, $dP_0/dt = 21230$ Pa/s, 52 ms après le début de l'injection.	145
5.7	Même figure que la figure 5.6 mais avec $dP_0/dt = 25263$ Pa/s. Les différences de forme et de pénétration sont clairement visibles.	145
5.8	Iso-contour de la richesse 52 ms après le début de l'injection, échelle intégrale égale à 0.4 mm.	146

5.9	Iso-contour de la richesse 52 ms après le début de l'injection, échelle intégrale égale à 1.4 mm.	147
5.10	Reproductibilité du jet 19 ms après le début de l'injection. Gauche : LES. Droite : expérience. La longueur de pénétration du jet est en accord avec les résultats expérimentaux.	147
5.11	Variance de la variable de progrès dans la fenêtre de visualisation 4 ms après l'allumage. Maillage à 304 millions d'éléments.	148
5.12	Recherche de la valeur de la variable de progrès pour laquelle le terme source est maximal.	149
5.13	Mesure de vitesse de flamme laminaire étirée grâce à un suivi de flamme par level-set. Le rouge correspond aux gaz brûlés et le bleu aux gaz frais. Gauche : temps t . Droite : temps $t + \Delta t$	150
5.14	Densité de probabilité de la vitesse laminaire pour le cas $C2$ du chapitre 4.	151
5.15	Profil moyen du champ de vitesse juste avant l'allumage. Gauche : moyenne numérique : 12 plans issus de 6 simulations. Droite : moyenne expérimentale : 100 mesures.	152
5.16	Profil moyen de la fraction de mélange juste avant l'allumage. Gauche : moyenne numérique : 12 plans issus de 6 simulations. Droite : moyenne expérimentale : 100 mesures.	152
5.17	Profil de la vitesse moyenne le long de la droite $X = -8.5$ mm. Ligne continue : profil numérique. Ligne pointillée : profil expérimental.	153
5.18	Profil de la vitesse moyenne le long de la droite $Y = 0.5$ mm. Ligne continue : profil numérique. Ligne pointillée : profil expérimental.	153
5.19	Profil de la richesse moyenne le long des droites $X = -8.5$ mm et $Y = 0.5$ mm. Ligne continue : profil numérique. Ligne pointillée : profil expérimental.	154
5.20	Champ instantané de fraction de mélange au moment de l'allumage. Gauche : LES. Droite : expérimental.	155
5.21	Champ instantané de vitesse au moment de l'allumage. Gauche : LES. Droite : expérimental.	155
5.22	Iso-surface du critère $Q = 2.10^5 s^{-2}$ coloriée par la norme de la vitesse juste avant l'allumage, à $t = 52$ ms.	156
5.23	Coefficient d'asymétrie en fonction du temps pour les différents cas.	157
5.24	Champs instantanés de vitesse à $t = 5$ ms. Impossibilité de différencier le mouvement dû à la vitesse initiale de celui impliqué par la stratification.	158
5.25	Champs instantanés de combustion homogène et stratifiée.	159
5.26	Champs instantanés de vitesse et de richesse d'une combustion stratifiée turbulente. 160	
5.27	Champs instantanés de vitesse et de richesse d'une combustion stratifiée turbulente, suite de la figure 5.26.	161
5.28	Champs instantanés de richesse à $t = 5$ ms. Gauche : numérique. Droite : expérimental.	162
5.29	Contours moyens de la flamme. Gauche : numérique (six simulations). Droite : expérimental (100 réalisations).	162
5.30	Evolution temporelle du contour moyen dans la fenêtre de visualisation, colorié respectivement par la richesse (a), la vitesse absolue (b) et la vitesse du fluide le long de la normale (c).	163
5.31	Simulation 3D : iso-surface du contour de flamme, à $t = 5$ ms, coloriée par la richesse.	163

5.32	Diagramme de dispersion de la vitesse laminaire moyennée en fonction de la richesse pour différentes milli-secondes.	164
5.33	Diagramme de dispersion de la vitesse laminaire en fonction de la richesse, tracé à chaque milli-seconde.	164
5.34	Extraction du contour de flamme défini par l'iso-contour de la variable de progrès $C = 0.73$	165
5.35	Lissage du contour de flamme grâce à l'application de plusieurs filtres.	165
5.36	Champ de courbure sur le contour de flamme.	166
5.37	Champ de richesse reconstruit sur le contour de flamme.	166
5.38	Diagramme de dispersion de la vitesse laminaire en fonction de la courbure à différents instants pour des petites bandes de richesse. Les bandes de richesse diffèrent selon le temps du fait de l'évolution de la flamme dans le mélange stratifié.	167
5.39	Courbes de la vitesse laminaire en fonction de la courbure pour des richesses comprises entre 0.64 et 0.66 à $t = 5$ ms.	168
5.40	Champ de vitesse dans la fenêtre de visualisation, les gaz brûlés ne sont plus cachés.	169
5.41	Courbes de $[\rho]s_a^2$ théorique et simulé pour le cas stratifié en fonction de la richesse, à $t = 4$ ms.	170
5.42	Courbes du saut d'impulsion ($[\rho]s_a^2 * S$) théorique et simulé pour le cas stratifié en fonction de la richesse, à $t = 4$ ms.	170
5.43	Courbes du bilan de masse ($ \rho_{BG}u_{BG} $) théorique et simulé pour le cas stratifié en fonction de la richesse, à $t = 4$ ms.	171
5.44	PDF du rayon de la flamme instantanée à $t = 5$ ms.	173
5.45	Esquisse du contour en tant que déformation d'une sphère. Le rayon devient une fonction des angles θ et ϕ ainsi que du temps.	173
5.46	Evolution temporelle de la forme globale de la flamme décrite par les modes 0 à 3, coloriée par φ	174
5.47	Harmoniques sphériques avec les modes multipliés par 2 à partir du 4 ^{eme} , coloriées par différentes variables à $t = 5$ ms.	176
6.1	Profils initiaux de la fraction massique de propane le long de l'axe Y pour les différents cas.	179
6.2	Rayon de flamme en fonction du taux de dilution à un instant donné, $t = 7$ ms.	180
6.3	Contour de flamme du cas $D4_{EGR}$. Le contour de flamme est tracé à chaque milli-seconde, de 1 à 7 ms.	181
6.4	Evolution temporelle du coefficient d'asymétrie pour différents taux de dilution.	182
6.5	Evolution temporelle de la vitesse absolue pour différents taux de dilution au point 1.	183
6.6	Evolution temporelle de la vitesse absolue pour différents taux de dilution au point 2.	183
6.7	Evolution temporelle du coefficient d'asymétrie pour le cas $D4$, rencontrant un mélange dilué en gaz brûlés ou un mélange de gaz frais plus pauvre.	184
6.8	Valeur du coefficient d'asymétrie pour les différents cas étudiés, à $t = 7$ ms.	185
6.9	Champs de fraction massique du dihydrogène. Gauche : cas $D4_Z$. Milieu : cas $D4_{EGR}$. Droite : cas $D7_{EGR}$. Carré de 8 cm de côté.	186
6.10	Evolution temporelle de la température le long de l'axe Y positif. Gauche : cas $D4_{EGR}$. Droite : cas $D4_Z$	186

6.11	Evolution temporelle de la vitesse absolue le long de l'axe Y positif pour le cas $D4$, rencontrant un mélange dilué en gaz brûlés ou un mélange de gaz frais plus pauvre.	187
6.12	Evolution temporelle de la vitesse laminaire le long de l'axe Y positif pour le cas $D4$, rencontrant un mélange dilué en gaz brûlés ou un mélange de gaz frais plus pauvre.	188
6.13	Champs de fraction massique de propane. Flamme établie rencontrant un gradient de gaz brûlés.	190
6.14	Champs du terme source de propane. Flamme établie rencontrant un gradient de gaz brûlés.	191
6.15	Champ de vitesse à $t = 11$ ms. Les lignes de courant présentes dans les gaz brûlés ont été tracées.	191
B.1	Illustration d'un volume de contrôle basé sur les noeuds. \bar{x}_p est le barycentre du volume de contrôle tandis que x_p est le noeud de calcul pour ce même volume.	211
C.1	Champ du temps passé dans le calcul des termes sources chimiques pour le cas $C3$ du chapitre 4.	215
C.2	Courbe du coût CPU lors du calcul des termes sources chimiques le long de l'axe Y positif, extrait de la figure C.1.	215
C.3	Schéma de l'algorithme implanté pour créer l'équilibrage de charge dynamique.	216
C.4	Temps CPU nécessaire pour le calcul des termes sources chimiques en fonction du numéro de processeur, lorsque la répartition dynamique n'est pas active.	218
C.5	Comparaison entre la répartition de charge statique et dynamique.	218
C.6	Scale-up avec ou sans répartition dynamique de la charge.	219
C.7	Découpage du domaine. Gauche : découpage orthogonal au front de flamme. Droite : découpage parallèle au front de flamme.	220

Annexe A

Mécanisme Propane-Air semi-détaillé

No	Reaction	$A_n(cgs)$	b_n	$E_n(cal/mol)$
1	$2H+M \rightarrow H_2+M$ third-body efficiencies / H ₂ 2.5 / H ₂ O 12.0 / CO 1.9 / CO ₂ 3.8 /	1.146E+20	-1.680	820.030
2	$O+H_2 \rightleftharpoons H+OH$	5.080E+04	2.670	6292.070
3	$O+H+M \rightarrow OH+M$ third-body efficiencies / AR 0.8 / H ₂ 2.5 / H ₂ O 12.0 / CO 1.5 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 2.0	4.714E+18	-1.000	0.000
4	$OH+H_2 \rightleftharpoons H+H_2O$	2.160E+08	1.510	3429.970
5	$H_2O+M \rightleftharpoons H+OH+M$ third-body efficiencies / AR 0.4 / H ₂ 0.7 / H ₂ O 12.0 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0	1.912E+23	-1.830	118500.000
6	$O+H_2O \rightleftharpoons 2OH$	2.970E+06	2.020	13400.100
7	$H+O_2(+M) \rightleftharpoons HO_2(+M)$ k_∞ 1.475E+12 0.600 0.000 k_0 3.48E+16 -0.41 -1115.0 $a_0 = 0.1527$ $a_1 = 290$ $a_2 = 2700$ $a_3 = 7700$ third-body efficiencies / AR 0.7 / H ₂ 1.3 / H ₂ O 14.0 / CO 1.9 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 3.8			
8	$H+O_2 \rightleftharpoons O+OH$	1.915E+14	0.000	16440.010
9	$HO_2+O \rightarrow OH+O_2$	3.250E+13	0.000	0.000
10	$HO_2+H \rightarrow H_2+O_2$	1.660E+13	0.000	822.900
11	$HO_2+OH \rightleftharpoons H_2O+O_2$	2.890E+13	0.000	-496.890
12	$HO_2+H \rightarrow 2OH$	7.079E+13	0.000	294.930
13	$CH+O_2 \rightarrow HCO+O$	3.300E+13	0.000	0.000
14	$CH_2[S]+OH \rightarrow CH_2O+H$	3.000E+13	0.000	0.000
15	$CH_2[S]+O \rightarrow CO+2H$	3.000E+13	0.000	0.000
16	$CH_2[S]+H \rightleftharpoons CH+H_2$	3.000E+13	0.000	0.000
17	$CH_2[S]+O_2 \rightarrow CO+OH+H$	7.000E+13	0.000	0.000
18	$CH_2[S]+H_2 \rightleftharpoons CH_3+H$	7.000E+13	0.000	0.000
19	$CH_3+O_2 \rightarrow CH_2O+OH$	6.865E+01	2.860	10169.930
20	$CH_3+H(+M) \rightarrow CH_4(+M)$ k_∞ 2.140E+15 -0.400 0.000 k_0 3.31E+30 -4.00 2108.0 $a_0 = 0.1527$ $a_1 = 290$ $a_2 = 2700$ $a_3 = 7700$ third-body efficiencies / AR 0.7 / H ₂ 2.0 / H ₂ O 6.0 / CO 1.5 / CH ₄ 3.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 2.0			

(continued)

No	Reaction	$A_n(cgs)$	b_n	$E_n(cal/mol)$
21	$CH_3+O_2 \rightleftharpoons CH_3O+O$	6.082E+07	1.540	26390.060
22	$CH_3+OH \rightleftharpoons CH_3O+H$	7.226E+11	0.000	5483.990
23	$CH_3+OH \rightleftharpoons CH_2[S]+H_2O$	6.440E-08	5.800	-963.910
24	$CH_3+HO_2 \rightarrow CH_4+O_2$	3.000E+12	0.000	0.000
25	$2CH_3(+M) \rightleftharpoons C_2H_6(+M)$	k_∞ 6.770E+16	-1.180	653.920
		k_0 3.40E+41	-7.03	2763.0
	$a_0 = 0.1527$ $a_1 = 290$ $a_2 = 2700$ $a_3 = 7700$			
	third-body efficiencies / AR 0.4 / H ₂ 2.5 / H ₂ O 6.3 / CO 1.9 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 3.8			
26	$CH_3+HO_2 \rightarrow CH_3O+OH$	1.150E+13	0.000	0.000
27	$CH_2[S]+CH_3 \rightarrow C_2H_4+H$	2.000E+13	0.000	0.000
28	$CH_3+O \rightarrow CH_2O+H$	8.000E+13	0.000	0.000
29	$CH_2[S]+CH_4 \rightleftharpoons 2CH_3$	1.600E+13	0.000	-570.030
30	$CH_4+OH \rightleftharpoons CH_3+H_2O$	4.160E+04	2.640	2099.900
31	$CH_4+O \rightleftharpoons CH_3+OH$	6.920E+08	1.560	8484.940
32	$CH_4+H \rightleftharpoons CH_3+H_2$	3.860E+06	2.110	7750.000
33	$CH+CH_4 \rightarrow C_2H_4+H$	6.000E+13	0.000	0.000
34	$CO+O_2 \rightarrow CO_2+O$	1.068E-15	7.130	13320.030
35	$CO+OH \rightleftharpoons CO_2+H$	1.400E+05	1.950	-1347.040
36	$CO+HO_2 \rightarrow CO_2+OH$	3.010E+13	0.000	23000.000
37	$CO+O(+M) \rightarrow CO_2(+M)$	k_∞ 1.800E+10	0.000	2384.080
		k_0 1.35E+24	-2.79	4191.0
	$a_0 = 0.1527$ $a_1 = 290$ $a_2 = 2700$ $a_3 = 7700$			
	third-body efficiencies / AR 0.5 / H ₂ 2.0 / H ₂ O 6.0 / O ₂ 6.0 / CO 1.5 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 3.5			
38	$HCO+O_2 \rightarrow CO+HO_2$	7.580E+12	0.000	409.890
39	$HCO+OH \rightarrow CO+H_2O$	1.020E+14	0.000	0.000
40	$HCO+HO_2 \rightarrow CH_2O+O_2$	1.168E+05	2.010	-4717.020
41	$HCO+CH_3 \rightarrow CH_4+CO$	1.210E+14	0.000	0.000
42	$HCO+M \rightleftharpoons H+CO+M$	1.860E+17	-1.000	17000.000
	third-body efficiencies / H ₂ 2.0 / H ₂ O 6.0 / O ₂ 12.0 / CO 1.5 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 2.0			
43	$HCO+H \rightarrow CO+H_2$	7.340E+13	0.000	0.000
44	$HCO+OH \rightarrow HOCHO$	1.000E+14	0.000	0.000
45	$2HCO \rightarrow CH_2O+CO$	1.800E+13	0.000	0.000
46	$HCO+O \rightarrow CO_2+H$	3.000E+13	0.000	0.000
47	$HCO+HO_2 \rightarrow CO_2+H+OH$	3.000E+13	0.000	0.000
48	$HCO+O \rightarrow CO+OH$	3.020E+13	0.000	0.000
49	$CH+CH_2O \rightarrow H+CH_2CO$	9.460E+13	0.000	-515.060
50	$CH_2O+OH \rightleftharpoons HCO+H_2O$	3.430E+09	1.180	-446.940

(continued)

No	Reaction	$A_n(cgs)$	b_n	$E_n(cal/mol)$
51	$CH_2O+H \rightleftharpoons HCO+H_2$	5.740E+07	1.900	2739.960
52	$CH_2O+O \rightarrow HCO+OH$	6.260E+09	1.150	2260.040
53	$CH_2O+CH_3 \rightarrow HCO+CH_4$	3.636E-06	5.420	998.090
54	$CH_3O+H \rightarrow CH_2O+H_2$	2.000E+13	0.000	0.000
55	$CH_3O+CH_3 \rightarrow CH_2O+CH_4$	1.200E+13	0.000	0.000
56	$CH_3O+O_2 \rightarrow CH_2O+HO_2$	4.380E-19	9.500	-5500.960
57	$CH_3O(+M) \rightarrow CH_2O+H(+M)$	k_∞ 6.800E+13	0.000	26169.930
		k_0 1.87E+25	-3.00	24310.0
	$a_0 = 0.1527 \ a_1 = 290 \ a_2 = 2700 \ a_3 = 7700$			
58	$CH_2[S]+CO_2 \rightarrow CH_2O+CO$	3.000E+12	0.000	0.000
59	$HOCHO \rightleftharpoons CO_2+H_2$	1.500E+16	0.000	57000.000
60	$HOCHO \rightleftharpoons CO+H_2O$	2.300E+13	0.000	50000.000
61	$HOCHO+OH \rightarrow H_2O+CO_2+H$	2.620E+06	2.060	916.110
62	$C_2H_2+OH \rightarrow CH_2CO+H$	3.236E+13	0.000	12000.000
63	$C_2H_2+OH \rightarrow CH_3+CO$	4.830E-04	4.000	-2000.000
64	$C_2H_2+H(+M) \rightleftharpoons C_2H_3(+M)$	k_∞ 5.600E+12	0.000	2400.100
		k_0 3.80E+40	-7.27	7220.0
	$a_0 = 0.1527 \ a_1 = 290 \ a_2 = 2700 \ a_3 = 7700$			
	third-body efficiencies / AR 0.7 / H ₂ 2.0 / H ₂ O 6.0 / CO 1.5 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 2.0			
65	$C_2H_2+O_2 \rightarrow HCCO+OH$	2.000E+08	1.500	30099.900
66	$C_2H_2+O \rightarrow HCCO+H$	1.350E+07	2.000	1900.100
67	$C_2H_3+HO_2 \rightarrow C_2H_4+O_2$	6.563E+13	-0.540	2221.080
68	$CH_3+C_2H_3 \rightarrow CH_4+C_2H_2$	3.920E+11	0.000	0.000
69	$C_2H_3+O_2 \rightleftharpoons C_2H_2+HO_2$	1.340E+06	1.610	-384.080
70	$C_2H_3+H \rightarrow C_2H_2+H_2$	3.000E+13	0.000	0.000
71	$C_2H_3+O_2 \rightarrow CH_2O+HCO$	4.570E+16	-1.390	1012.910
72	$C_2H_3+OH \rightarrow C_2H_2+H_2O$	5.000E+12	0.000	0.000
73	$C_2H_3+H(+M) \rightarrow C_2H_4(+M)$	k_∞ 6.100E+12	0.270	280.110
		k_0 9.80E+29	-3.86	3320.0
	$a_0 = 0.1527 \ a_1 = 290 \ a_2 = 2700 \ a_3 = 7700$			
	third-body efficiencies / AR 0.7 / H ₂ 2.0 / H ₂ O 6.0 / CO 1.5 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 2.0			
74	$C_2H_4+CH_3 \rightleftharpoons C_2H_3+CH_4$	6.620E+00	3.700	9500.000
75	$C_2H_4+H \rightleftharpoons C_2H_3+H_2$	8.420E-03	4.620	2582.930
76	$C_2H_4+H(+M) \rightleftharpoons C_2H_5(+M)$	k_∞ 3.975E+09	1.280	1292.070
		k_0 4.72E+18	0.00	755.0
	$a_0 = 0.1527 \ a_1 = 290 \ a_2 = 2700 \ a_3 = 7700$			
	third-body efficiencies / AR 0.7 / H ₂ 2.0 / H ₂ O 6.0 / CO 1.5 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 2.0			

(continued)

No	Reaction	$A_n(cgs)$	b_n	$E_n(cal/mol)$
77	$C_2H_4+OH \rightleftharpoons C_2H_3+H_2O$	2.020E+13	0.000	5935.950
78	$C_2H_4+O \rightarrow CH_3+HCO$	1.020E+07	1.880	179.020
79	$C_2H_5+O_2 \rightarrow C_2H_4+HO_2$	3.000E+20	-2.860	6760.990
80	$C_2H_5+HO_2 \rightarrow C_2H_6+O_2$	3.560E+08	0.850	-1072.900
81	$C_2H_5+H(+M) \rightarrow C_2H_6(+M)$	k_∞ 5.270E+17	-0.990	1580.070
		k_0 1.99E+41	-7.08	6685.0
	$a_0 = 0.1527$ $a_1 = 290$ $a_2 = 2700$ $a_3 = 7700$			
	third-body efficiencies / AR 0.7 / H ₂ 2.0 / H ₂ O 6.0 / CO 1.5 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 2.0			
82	$C_2H_5+C_2H_3 \rightarrow 2C_2H_4$	5.765E+14	-0.630	2489.960
83	$CH_3+C_2H_5 \rightarrow CH_4+C_2H_4$	1.950E+13	-0.500	0.000
84	$C_2H_5+H \rightarrow C_2H_4+H_2$	2.000E+12	0.000	0.000
85	$CH_3+C_2H_5(+M) \rightleftharpoons C_3H_8(+M)$	k_∞ 1.880E+13	0.000	0.000
		k_0 2.71E+74	-16.82	13060.0
	$a_0 = 0.1527$ $a_1 = 290$ $a_2 = 2700$ $a_3 = 7700$			
	third-body efficiencies / AR 0.7 / H ₂ 2.0 / H ₂ O 6.0 / CO 1.5 / CH ₄ 2.0 / C ₂ H ₆ 3.0 / CO ₂ 2.0			
86	$C_2H_5+H \rightleftharpoons 2CH_3$	9.854E+11	0.490	-4440.010
87	$C_2H_6+CH_3 \rightarrow C_2H_5+CH_4$	1.510E-07	6.000	6047.080
88	$CH_2[S]+C_2H_6 \rightarrow CH_3+C_2H_5$	1.200E+14	0.000	0.000
89	$C_2H_6+H \rightleftharpoons C_2H_5+H_2$	5.540E+02	3.500	5167.070
90	$C_2H_6+OH \rightleftharpoons C_2H_5+H_2O$	5.800E+07	1.730	1159.890
91	$C_2H_6+O \rightarrow C_2H_5+OH$	3.550E+06	2.400	5830.070
92	$H+HCCO \rightleftharpoons CH_2[S]+CO$	1.100E+13	0.000	0.000
93	$HCCO+O_2 \rightarrow CO_2+HCO$	2.400E+11	0.000	-853.970
94	$HCCO+O \rightarrow H+2CO$	8.000E+13	0.000	0.000
95	$CH+HCCO \rightarrow CO+C_2H_2$	5.000E+13	0.000	0.000
96	$HCCO \rightleftharpoons CH+CO$	1.008E+17	-1.000	65190.010
97	$HCCO+OH \rightarrow 2HCO$	1.000E+13	0.000	0.000
98	$CH_2CO+H \rightleftharpoons HCCO+H_2$	2.000E+14	0.000	8000.000
99	$CH_2CO+OH \rightleftharpoons HCCO+H_2O$	1.000E+13	0.000	2000.000
100	$CH_2CO+H \rightarrow CH_3+CO$	1.100E+13	0.000	3400.100
101	$CH_2[S]+CH_2CO \rightarrow C_2H_4+CO$	1.600E+14	0.000	0.000
102	$CH_2CO+O \rightarrow HCCO+OH$	1.000E+13	0.000	8000.000
103	$C_3H_6+O \rightarrow CH_2CO+CH_3+H$	2.500E+07	1.760	76.000
104	$C_3H_6+H \rightleftharpoons C_2H_4+CH_3$	4.830E+34	-5.810	18500.000
105	$C_3H_6+O \rightarrow C_2H_5+HCO$	1.580E+07	1.760	-1216.060
106	$C_3H_6 \rightleftharpoons C_2H_3+CH_3$	2.730E+62	-13.280	123200.050
107	$NC_3H_7 \rightleftharpoons CH_3+C_2H_4$	1.007E+41	-8.601	41432.600
108	$NC_3H_7+HO_2 \rightarrow C_3H_8+O_2$	3.400E+10	0.279	-57.360

(continued)

No	Reaction	$A_n(cgs)$	b_n	$E_n(cal/mol)$
109	$NC_3H_7 \rightleftharpoons H + C_3H_6$	8.870E+39	-8.101	46582.700
110	$H + C_3H_8 \rightleftharpoons H_2 + NC_3H_7$	2.235E+04	3.061	4280.830
111	$C_3H_8 + OH \rightarrow NC_3H_7 + H_2O$	6.504E+08	1.387	596.560
112	$C_3H_8 \rightleftharpoons NC_3H_7 + H$	4.526E+16	-0.078	98321.460
113	$C_2H_5 + C_3H_8 \rightarrow C_2H_6 + NC_3H_7$	2.000E+11	0.000	10400.100
114	$C_3H_8 + O \rightarrow NC_3H_7 + OH$	3.263E+04	3.010	3170.650
115	$CH_3 + C_3H_8 \rightarrow CH_4 + NC_3H_7$	6.558E+02	2.856	7038.960
116	$C_3H_6OOH_{1-2} \rightleftharpoons C_3H_6 + HO_2$	3.534E+13	-0.537	12536.090
117	$NC_3H_7O_2 \rightleftharpoons C_3H_6OOH_{1-2}$	4.342E+11	0.412	29298.520
118	$NC_3H_7O_2 \rightleftharpoons NC_3H_7 + O_2$	1.330E+23	-2.355	38065.010

Détails sur le code YALES2

Ce code, développé au laboratoire du CORIA, est un code LES Low-Mach qui s'applique sur des maillages non-structurés. Il est basé sur la méthode des volumes finis et est utilisé pour la réalisation de tous les calculs présentés dans ce manuscrit.

B.1 Discrétisation spatiale

Le code YALES2 est basé sur la méthode des volumes finis. Le domaine doit donc être divisé en de petits éléments. Le code actuel permet de traiter des maillages non structurés. Différents types d'éléments peuvent être utilisés pour la réalisation du maillage tels que des triangles ou des quadrilatères en deux dimensions. Les éléments disponibles en trois dimensions sont les tétraèdres, les prismes, les pyramides et les hexaèdres.

Les volumes de contrôle, sur lesquels les équations de transport seront intégrées, sont construits autour de chaque noeud composant le maillage. Un exemple de volume de contrôle est représenté sur la figure B.1.

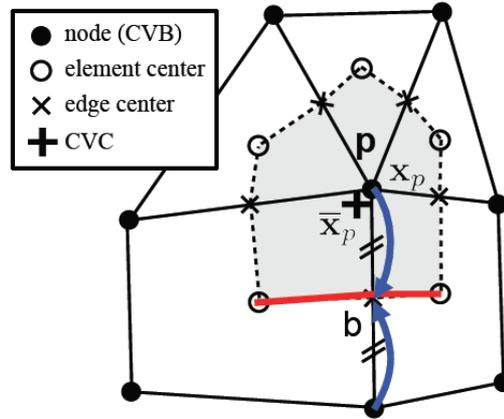


Fig B.1 – Illustration d'un volume de contrôle basé sur les noeuds. \bar{x}_p est le barycentre du volume de contrôle tandis que x_p est le noeud de calcul pour ce même volume.

YALES2 utilise un schéma centré aux noeuds. Toutes les valeurs des scalaires, de la pression et de la vitesse sont collectées au niveau de ceux-ci. Plus de détails concernant la discrétisation spatiale utilisée sont disponibles dans la thèse de Vantieghem [189].

B.2 Choix des schémas numériques

Plusieurs schémas temporels et spatiaux sont disponibles dans YALES2. Le choix de ceux-ci est laissé à l'utilisateur.

L'avancement explicite en temps peut être réalisé par des schémas de Runge-Kutta du second, troisième ou quatrième ordre. Un schéma plus récent, basé sur une combinaison des schémas

Runge-Kutta et Lax-Wendroff, nommé TFV4A [98] est aussi disponible.

En ce qui concerne la discrétisation spatiale, celle-ci peut être effectuée au second ou au quatrième ordre. La précision spatiale du quatrième ordre est obtenue en augmentant l'ordre d'interpolation sur les surfaces du volume de contrôle et en réalisant une déconvolution des valeurs intégrées.

Le choix du solveur servant à la résolution de l'équation de Poisson doit aussi être effectué. Les solveurs inclus dans YALES2 sont le solveur PCG (pour Preconditioned Conjugate Gradient) [47] et sa version avec déflation DPCG [128]. Les méthodes BICGSTAB et BICGSTAB(2) sont également disponibles.

Au cours de cette thèse, il a été choisi de travailler avec le schéma TFV4A et une discrétisation spatiale du quatrième ordre. Concernant la résolution de l'équation de Poisson, le solveur DPCG a été utilisé.

B.3 Solveur à densité variable

Le code YALES2 propose de nombreux solveurs. Dans cette thèse, seul le solveur à densité variable est utilisé. Son principe est brièvement décrit ci-après.

L'avancement en temps est basé sur la méthode de pas fractionné proposé par Chorin [39] puis Kim et Moin [93]. Cette méthode était à la base proposée pour des fluides incompressibles mais a été étendue aux fluides compressibles [144]. La vitesse est résolue à chaque pas de temps soit n , $n+1$, etc alors que les scalaires, la densité et la pression sont résolus sur des pas de temps décalés $n+1/2$, $n+3/2$, etc. La méthode de résolution est expliquée ci-après, en se basant sur un volume de contrôle :

1. Un prédicteur de densité, ρ^* est calculé à l'aide de l'équation de conservation,

$$\frac{\rho^* - \rho^{n+1/2}}{\Delta t} + C_\rho^n = 0, \quad (\text{B.1})$$

où le terme convectif C_ρ^n est évalué au temps n .

2. Les scalaires sont ensuite avancés, sous leur forme conservative en résolvant de manière fractionnée l'équation suivante :

$$\frac{(\rho\phi)^* - (\rho\phi)^{n+1/2}}{\alpha^* \Delta t} + C_{\rho\phi}^{n+1/2} = D_{\rho\phi}^{n+1/2} + S_{\rho\phi}^{n+1/2}, \quad (\text{B.2})$$

où les termes $C_{\rho\phi}^{n+1/2}$, $D_{\rho\phi}^{n+1/2}$ et $S_{\rho\phi}^{n+1/2}$ se rapportent respectivement à la convection, la diffusion et aux termes sources scalaires au temps $n+1/2$.

3. La densité doit ensuite être avancée. Tout d'abord, la densité $\rho^{n+3/2}$ est calculée comme étant une valeur relaxée comprise entre la valeur prédite, ρ^* , et une valeur issue de l'équation d'état ρ_{eos} . Pour l'équation d'état relative aux gaz parfaits, on a :

$$\rho_{eos} = \frac{P_0 W^*}{RT^*}, \quad (\text{B.3})$$

où le symbole * fait référence aux valeurs trouvées grâce aux scalaires prédits. Pour rappel, P_0 est uniforme dans le domaine. Lors de la simulation d'un domaine fermé, il est nécessaire de prendre en compte l'évolution temporelle de cette pression. Une méthode allant dans ce sens est proposée dans la section 5.3.3.

La densité au temps $n+3/2$ est calculée comme un barycentre de ρ_{eos} et ρ^* ,

$$\rho^{n+3/2} = \alpha_{relax} \rho_{eos} + (1 - \alpha_{relax}) \rho^*. \quad (\text{B.4})$$

Le terme α représente un facteur de relaxation servant à s'abstraire des problèmes numériques survenant lors de la variation brutale de la densité.

La valeur $\alpha = 0.7$ est typiquement adoptée pour des configurations stationnaires et établies. La densité "exacte" compatible avec l'équation d'état n'est pas conservée. Si des problèmes d'ordre numérique surviennent, cette valeur peut être modifiée. Une valeur de $\alpha = 0.5$ semble en effet offrir plus de stabilité.

Grâce à cette valeur estimée, la densité au temps $n + 1$ est déterminée ,

$$\rho^{n+1} = \frac{1}{2} \left(\rho^{n+1/2} + \rho^{n+3/2} \right). \quad (\text{B.5})$$

4. Le prédicteur de vitesse est ensuite avancé,

$$\frac{(\rho \mathbf{u})^* - (\rho \mathbf{u})^n}{\Delta t} + C_\rho^n = D_{\rho u}^n - \nabla P_2^{n-1/2}, \quad (\text{B.6})$$

où $P_2^{n-1/2}$ est le champ de pression déjà connu. A ce niveau, on remarque que le prédicteur de vitesse $(\rho \mathbf{u})^*$ ne satisfait pas l'équation de continuité. Par conséquent, une étape de correction est nécessaire.

5. Pour satisfaire l'équation de continuité, la pression est avancée du temps $n - 1/2$ au temps $n + 1/2$,

$$\nabla P_2^{n+1/2} = \frac{(\rho \mathbf{u})^{n+1} - (\rho \mathbf{u})^*}{\Delta t} + \nabla P_2^{n-1/2}. \quad (\text{B.7})$$

L'influence de la pression précédente est retirée afin de corriger la vitesse par la nouvelle valeur de la pression. La vitesse au temps $n + 1$ doit vérifier l'équation de continuité, soit :

$$\nabla \cdot (\rho \mathbf{u}^{n+1}) = - \left(\frac{\partial \rho}{\partial t} \right)^{n+1} \approx - \frac{\rho^{n+3/2} - \rho^{n+1/2}}{\Delta t}. \quad (\text{B.8})$$

La pression au temps $n + 1/2$ est estimée par résolution de l'équation de Poisson provenant des équations (B.7) et (B.8) :

$$\Delta (P_2^{n+1/2} - P_2^{n-1/2}) = \frac{\rho^{n+3/2} - \rho^{n+1/2}}{\Delta t^2} - \frac{1}{\Delta t} \nabla \cdot (\rho \mathbf{u})^*. \quad (\text{B.9})$$

6. Une dernière étape est réalisée pour corriger la vitesse en prenant en compte le nouveau gradient de pression. Les scalaires sont eux aussi corrigés, grâce à la nouvelle vitesse suivant l'équation (B.2).

Fonctionnement général d'un scheduler dynamique

C.1 Principe

Le but d'un équilibrage de charge est de donner à chaque processeur la même quantité de travail à effectuer. Cela permet de synchroniser les processeurs entre eux, c'est-à-dire qu'ils effectuent la même tâche au même instant. Dans YALES2, cet équilibrage de charge est effectué grâce à une double décomposition du domaine [124]. Une première décomposition est réalisée en découpant le domaine en np sous-domaines de taille égale, np correspondant au nombre de processeurs. Dans une seconde étape, chaque processeur divise son domaine en sous-groupes dont le nombre de cellules par groupe est imposé par l'utilisateur. Cette double décomposition est vraiment performante lorsque toutes les cellules ou noeuds du domaine ont la même quantité de travail à effectuer.

Malheureusement, cette condition n'est pas toujours vérifiée. En effet, lors de la résolution des termes sources chimiques, des problèmes raides sont rencontrés, comme montré dans la section 3.4.3. Les termes sources sont simples à évaluer et sans grand coût CPU dans la partie gaz frais et gaz brûlés mais sont relativement coûteux en temps dans le front de flamme. Le temps passé dans le terme source en chaque point pour une itération du cas *C3* présenté dans le chapitre 4 est représenté sur la figure C.1. Les valeurs le long de l'axe Y positif sont extraites et tracées sur la figure C.2.

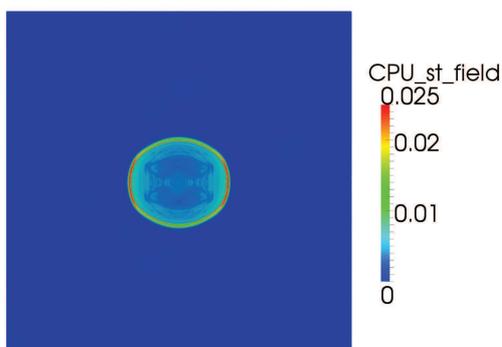


Fig C.1 – Champ du temps passé dans le calcul des termes sources chimiques pour le cas *C3* du chapitre 4.

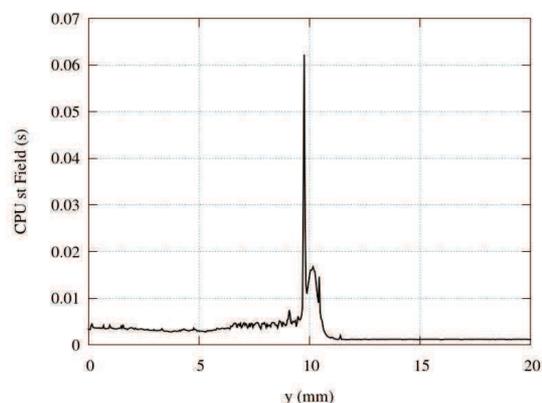


Fig C.2 – Courbe du coût CPU lors du calcul des termes sources chimiques le long de l'axe Y positif, extrait de la figure C.1.

Ces deux images montrent clairement que les processeurs traitant un sous-domaine où le front de flamme est présent passent beaucoup plus de temps à effectuer le calcul du terme source que ceux où les gaz sont au repos. Par conséquent, le coût CPU global du calcul est important car chaque processeur doit attendre que le plus lent ait fini avant de passer à la prochaine étape de calcul.

Afin de remédier à ce problème, un équilibrage de charge dynamique [65] a été mis en place dans YALES2 lors du calcul de l'intégration des termes sources. L'idée de cet équilibrage

dynamique est de répartir le calcul des termes sources. Les points où le front de flamme est présent, et donc demandant un temps de calcul plus important sont répartis sur l'ensemble des processeurs, même si cela exige plus de communications MPI. Nous verrons en effet que le temps passé dans les communications est négligeable par rapport au gain apporté par cette méthode.

C.2 Détails de la mise en oeuvre

Le diagramme représentant l'algorithme implanté dans le code pour la réalisation de l'équilibrage de charge dynamique pour le calcul des termes sources est donné sur la figure C.3.

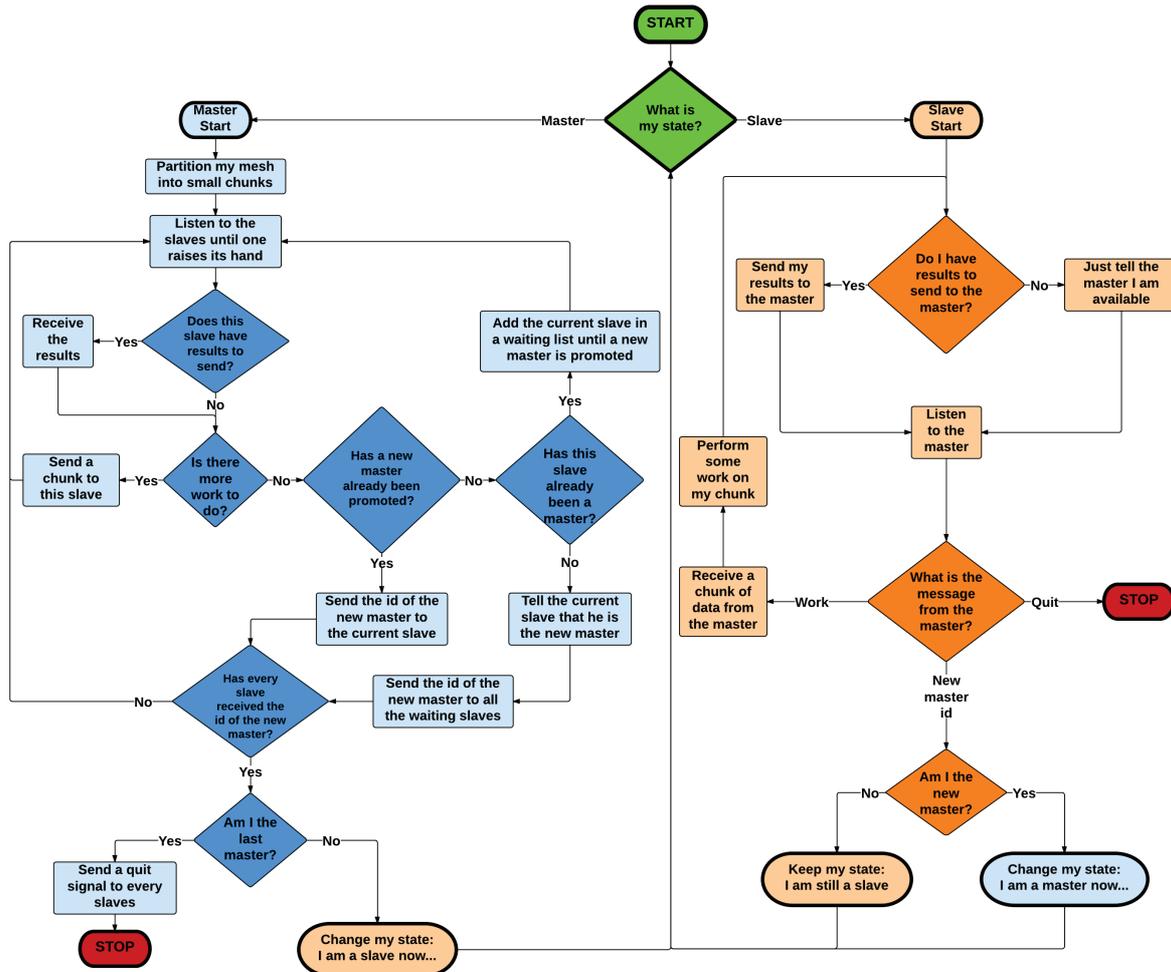


Fig C.3 – Schéma de l'algorithme implanté pour créer l'équilibrage de charge dynamique.

Un processeur peut avoir deux rôles : maître ou esclave. Un processeur a le rôle de maître tandis que les autres sont esclaves. Cependant, le maître peut changer au cours de l'itération.

Si le processeur est le maître, il doit :

1. découper le maillage en de tous petits domaines définis par le paramètre de granularité ;
2. attendre qu'un processeur esclave lui envoie un signal ;
3. récupérer le travail effectué par l'esclave si celui-ci a déjà travaillé pour le maître ;
4. s'il n'a plus de travail, trois situations s'offrent à lui :

- a) pour l'instant aucun processeur n'a été déclaré en tant que nouveau maître. Il doit alors regarder si l'esclave a déjà été maître durant l'itération. Si tel est le cas, l'esclave

est placé dans une liste d'attente jusqu'à ce qu'un nouveau maître soit défini. Le maître se rend ensuite à l'étape 2 ;

- b) si aucun processeur n'a été déclaré comme nouveau maître et dans le cas où le processeur esclave n'ait pas encore été maître, il doit dire au processeur esclave qu'il a été promu au rang de maître et informer tous les processeurs en attente qu'un nouveau maître a été désigné ;
 - c) si un nouveau maître a été désigné, il doit envoyer à l'esclave demandant du travail l'identité du nouveau maître.
- 4ii.** s'il a toujours du travail, envoyer un sous domaine à l'esclave pour qu'il le traite et retourner ensuite à l'étape 2 ;
- 5i.** si tous les esclaves ne connaissent pas l'identité du nouveau maître, le retour à l'étape 2 est nécessaire ;
- 5ii.** si tous les esclaves connaissent l'identité du nouveau maître, alors :
- a) si le maître n'est pas le dernier maître, le processeur passe à l'état d'esclave ;
 - b) si le maître est le dernier maître, il envoie un signal à tous les esclaves puis se quitte lui-même.

Si le processeur est esclave, il doit :

1. dire au maître qu'il est prêt à effectuer du travail ;
2. écouter ce que le maître lui dit, ce qui se réduit à trois possibilités :
 - a) le maître lui envoie du travail. L'esclave l'exécute puis renvoie les résultats obtenus au maître. Il repart alors à l'étape 1 ;
 - b) le maître lui envoie le signal de tout arrêter ;
 - c) le maître lui envoie l'identité du nouveau maître :
 - i. si l'esclave est le nouveau maître, il change son état ;
 - ii. sinon, il retourne à l'étape 1.

Deux points se doivent d'être soulignés. Premièrement, il est capital que plusieurs processeurs puissent avoir le rôle de maître simultanément. Cela permet aux communications MPI de se chevaucher et d'éviter que tous les processeurs soient en attente qu'une petite partie d'entre eux finisse leur travail. Deuxièmement, la taille des petits domaines sur lesquels le calcul est effectué est dictée par deux paramètres : la taille du schéma cinétique et la latence du réseau.

C.3 Performances

Afin de montrer les performances réalisées grâce à la mise en place d'une répartition dynamique, il est nécessaire de regarder les performances obtenues lorsque la répartition est statique. La figure C.4 est une belle illustration de ce cas. Elle représente le temps CPU passé dans chaque processeur pour calculer les termes sources chimiques lorsque l'équilibrage dynamique de charge n'est pas appliqué.

Cette figure a été obtenue lors de la réalisation d'un calcul sur 128 processeurs de la machine Antares du CRIHAN. Il est clairement visible que les charges sont mal réparties. En effet, 90% des processeurs ont une très petite charge CPU (autour de 25 s par itération) alors que 10% d'entre eux ont une grosse quantité de travail à fournir (jusqu'à 150 s par itération pour le processeur le plus chargé). Néanmoins, tous les processeurs doivent attendre que le processeur le plus chargé ait fini son travail avant de passer à l'étape suivante.

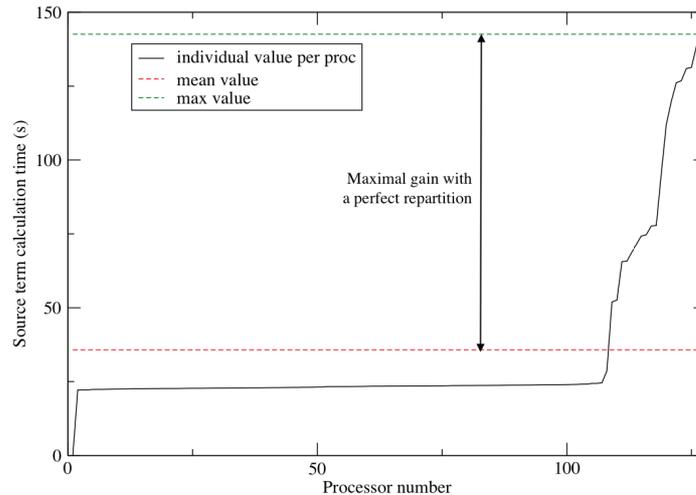


Fig C.4 – Temps CPU nécessaire pour le calcul des termes sources chimiques en fonction du numéro de processeur, lorsque la répartition dynamique n'est pas active.

Si l'on fait la moyenne du temps CPU, celle-ci est relativement faible, autour de 30s par itération (trait rouge pointillé sur la figure C.4). Cette valeur correspond à la valeur atteignable par un équilibrage de charge dynamique parfait. Cela signifie que le gain en temps CPU réalisé avec un équilibrage de charge dynamique peut aller jusqu'à 5.

Un nouveau cas test, celui du bec bunsen, est effectué pour montrer les différents temps CPU passés dans le calcul des termes sources chimiques en fonction des itérations du calcul. Le maillage contient 288544 triangles et 177377 noeuds. Le schéma cinétique utilisé est celui de

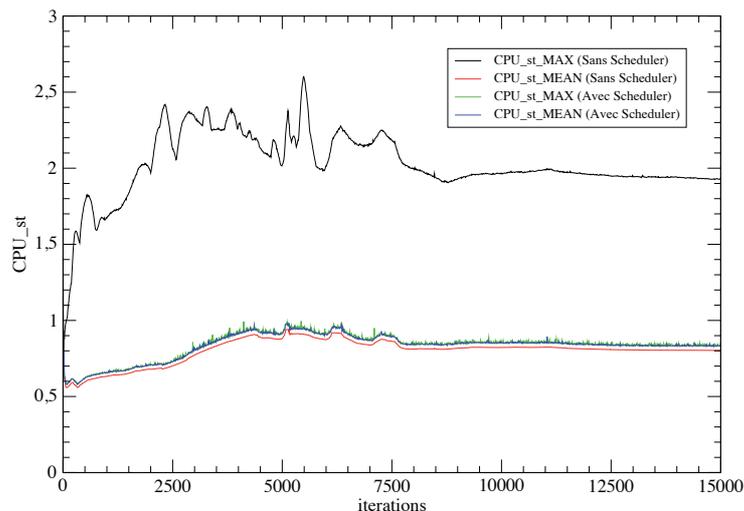


Fig C.5 – Comparaison entre la répartition de charge statique et dynamique.

Coffee [41] et la granularité est fixée à 10. Chaque processeur contient 2254 cellules et la seconde décomposition du domaine crée des groupes de 200 cellules.

Les résultats obtenus avec et sans répartition dynamique des charges sont représentés sur la figure C.5.

Deux types de mesures de CPU sont illustrées sur cette figure : premièrement, le temps CPU maximal sur tous les processeurs ; deuxièmement, le temps CPU moyen passé sur tous les processeurs.

Sans la répartition dynamique, le temps CPU maximal (ligne noire sur la figure C.5) est environ 2.5 fois plus grand que le temps CPU moyen (ligne rouge). Les charges sont donc mal réparties entre les processeurs. Avec la prise en compte de l'équilibrage de charge dynamique, le temps CPU maximal (ligne verte) et le temps CPU moyen (ligne bleue) sont quasiment confondus. La répartition entre les différents processeurs est donc bien réalisée. Tous les processeurs possèdent la même quantité de travail à effectuer. De plus, les temps CPU moyens avec (ligne bleue) et sans (ligne rouge) répartition dynamique sont très proches. Cela signifie que l'algorithme servant à la répartition est très efficace et que les communications MPI sont masquées.

L'extensibilité des répartitions statique et dynamique est ensuite testée. Pour cela, la simulation d'un même maillage est réalisée avec un nombre de processeurs croissant, figure C.6. Ce test a été effectué sur la machine Turing de l'IDRIS.

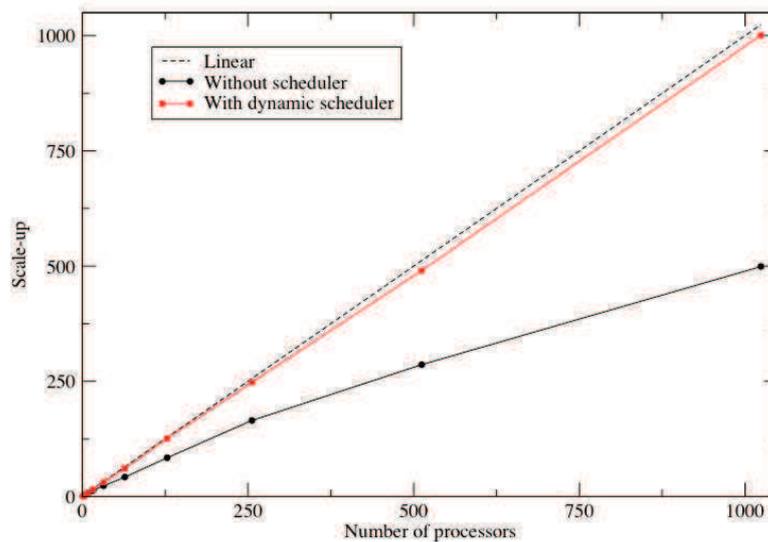


Fig C.6 – Scale-up avec ou sans répartition dynamique de la charge.

Sur cette figure, une autre limitation forte de l'approche statique est visible. L'extensibilité est vraiment faible en statique alors qu'elle est quasiment parfaite lorsque la répartition dynamique est utilisée.

Pour mieux comprendre ce phénomène, nous allons considérer la situation suivante, qui arrive quand un domaine donné est coupé en deux par l'algorithme de découpage, figure C.7.

Sur cette figure C.7, les notations FG , FF et BG font respectivement référence aux gaz frais, au front de flamme et aux gaz brûlés.

Si le découpage est fait de manière orthogonale au front de flamme, cela ne pose aucun problème. La densité de surface de flamme est inchangée pour chaque partie du domaine. Au contraire, si la coupe a lieu parallèlement au front de flamme, il est fort probable que les deux nouveaux sous-domaines possèdent des densités de surface de flamme différentes. Cette différence de densité implique que la valeur maximale de densité de surface de flamme par processeur peut

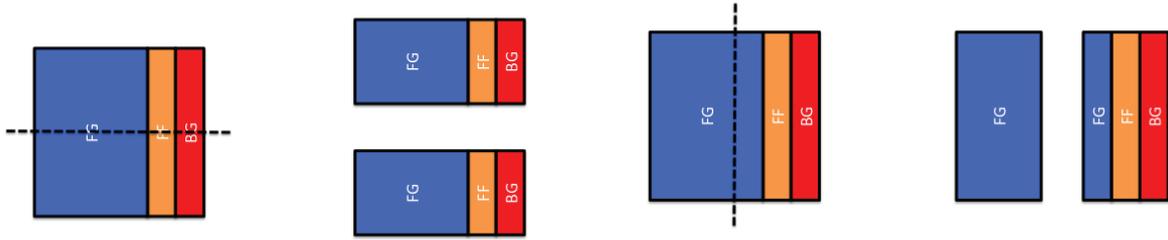


Fig C.7 – Découpage du domaine. Gauche : découpage orthogonal au front de flamme. Droite : découpage parallèle au front de flamme.

seulement augmenter lorsque le nombre de processeurs s'accroît.

Le problème est que la charge de CPU est directement liée à la densité de surface de flamme (là où le problème est très raide et le terme source long à calculer). Par conséquent, augmenter le nombre de processeurs améliore très peu le temps de restitution dans beaucoup de situations. Cette limitation n'a pas lieu d'être lorsque la répartition dynamique de charge est utilisée.

Publications et conférences

D.1 Publications

C. Gruselle, V. Moureau, G. Lartigue, P. Pepiot, Y. D'Angelo, F. Ravet. "Flame kernel expansion modeling in a stratified mixture. Part 1 : laminar case". En cours pour soumission Combustion and Flame.

C. Gruselle, V. Moureau, G. Lartigue, P. Pepiot, Y. D'Angelo, F. Ravet. "Flame kernel expansion modeling in a stratified mixture. Part 2 : turbulent case". En cours pour soumission Combustion and Flame.

D.2 Conférences

C. Gruselle, V. Moureau, Y. D'Angelo. "Etude du développement d'une flamme soumise à un gradient de concentration". Centre de Recherche sur la Combustion Turbulente, Toulouse, mars 2012.

C. Gruselle, V. Moureau, Y. D'Angelo. "Numerical simulation of turbulent stratified flame propagation in a closed vessel". Turbulence, Heat and Mass Transfer, Palerme (Italie), septembre 2012.

C. Gruselle, G. Lartigue, V. Moureau, Y. D'Angelo, F. Ravet. "Modeling of flame kernel expansion in a stratified mixture". LES for Internal Combustion Engine, Paris, novembre 2012.

C. Gruselle, P. Pepiot, G. Lartigue, V. Moureau, Y. D'Angelo, F. Ravet. "Modeling of flame kernel expansion in a stratified mixture". 65th APS DFD Meeting, San Diego (USA), novembre 2012.

C. Gruselle, P. Pepiot, G. Lartigue, V. Moureau, Y. D'Angelo, F. Ravet. "Investigation of flame kernel expansion in a stratified mixture using DNS and LES". 14th International Conference on Numerical Combustion, San Antonio (USA), avril 2013.

Bibliographie

- [1] <http://www.coria-cfd.fr>.
- [2] <http://www.paraview.org/>.
- [3] <http://www.w3.org/xml/>.
- [4] E. Albin. *Contribution à la modélisation numérique des flammes turbulentes : comparaisons DNS-EEM-Expériences*. PhD thesis, INSA Rouen, 2010.
- [5] E. Albin and Y. D'Angelo. Assessment of the evolution equation modelling approach for three-dimensional expanding wrinkled premixed flames. *Combustion and Flame*, 159 :1932–1948, 2012.
- [6] H. Albrecht, W. H. Herden, R. Maly, B. Saggau, and E. Wagner. New aspects on spark ignition. *SAE-770853*, 1977.
- [7] A. C. Alkidas. Combustion advancements in gasoline engines. *Energy Conversion and Management*, 48 :2751–2761, 2007.
- [8] P. Anselmo-Filho, S. Hochgreb, R. S. Barlow, and R. S. Cant. Experimental measurements of geometric properties of turbulent stratified flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :1763–1770, 2009.
- [9] P. Auzillon, O. Gicquel, N. Darabiha, D. Veynante, and B. Fiorina. A filtered tabulated chemistry model for lean stratified flames. *Combustion and Flame*, 159 :2704–2717, 2012.
- [10] O. Badr and G. Karim. Flame propagation in stratified methane-air mixtures. *Journal of Fire Sciences*, 2(6) :415–426, 1984.
- [11] S. Balusamy. *Etude expérimentale de la propagation de flammes dans un mélange stratifié*. PhD thesis, INSA Rouen, 2010.
- [12] S. Balusamy, A. Cessou, and B. Lecordier. Direct measurement of local instantaneous laminar burning velocity by a new piv algorithm. *Experiments in Fluids*, 50 :1109–1121, 2011.
- [13] S. Balusamy, A. Cessou, and B. Lecordier. Laminar propagation of lean premixed flames ignited in stratified mixture. *Combustion and Flame*, 2013.
- [14] E. Baudoin. *Large Eddy Simulation of Turbulent Premixed and Partially Premixed Combustion*. PhD thesis, Lund Institute of Technology, 2010.
- [15] S. Bentaleb. *Etude du déclenchement de combustion de mélanges air-propane et air-heptane par décharge mono-impulsionnelle nanoseconde*. PhD thesis, Université Paris-Sud XI, 2012.
- [16] R. W. Bilger. The structure of turbulent nonpremixed flames. *Twenty-Second Symposium (International) on Combustion*, pages 475–488, 1988.

- [17] R. W. Bilger, S. B. Pope, K. N. C. Bray, and J. F. Driscoll. Paradigms in turbulent combustion research. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :21–42, 2005.
- [18] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lighfoot. *Transport phenomena*. John Wiley and Sons, New York, USA, 2nd edition, 2002.
- [19] R. J. Blint. Flammability limits for exhaust gas diluted flames. *Symposium (International) on Combustion*, 22(1) :1547–1554, 1989.
- [20] R. J. Blint. Stretch in premixed laminar flames under ic engine conditions. *Combustion Science and Technology*, 75(1-3) :115–127, 1991.
- [21] B. J. Boersma, G. Brethouwer, and F. T. M. Nieuwstadt. A numerical investigation on the effect of the inflow conditions on the self-similar region of a round jet. *Phys. of Fluids*, 10 :899–909, 1998.
- [22] M. Boger, D. Veynante, H. Boughanem, and A. Trouvé. Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of turbulent premixed combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 27 :917–925, 1998.
- [23] A. Bonhomme, L. Selle, and T. Poinso. Curvature and confinement effects for flame speed measurements in laminar spherical and cylindrical flames. *Combustion and Flame*, 160 :1208–1214, 2013.
- [24] K. J. Bosschaart and L. P. H. de Goey. The laminar burning velocity of flames propagating in mixtures of hydrocarbons and air measured with the heat flux method. *Combustion and Flame*, 136 :261–269, 2004.
- [25] J. Boussinesq. *Essai sur la théorie des eaux courantes*. Mémoires présentés par divers savants à l’Académie des Sciences 23 (1) : 1-680, 1877.
- [26] D. Bradley, L. K. Kwa, A. K. C. Lau, and M. Missaghi. Laminar flamelet modeling of recirculation premixed methane and propane-air combustion. *Combustion and Flame*, 71(2) :109–122, 1988.
- [27] K. N. C. Bray. The challenge of turbulent combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 26 :1–26, 1996.
- [28] R. S. Brocaw. Approximate formulas for the viscosity and thermal conductivity of gas mixtures. *Journal of Chemical Physics*, 29(2), 1958.
- [29] S. P. Burke and T. E. W. Schumann. Diffusion flames. *Industrial and Engineering Chemistry*, 20 :998–1005, 1928.
- [30] T. Butler and P. O’Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. *Symposium (International) on Combustion*, 16 :1503–1515, 1977.
- [31] P. Cadman, G. O. Thomas, and P. Butler. The auto-ignition of propane at intermediate temperatures ad high pressures. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2 :5411–5419, 2000.
- [32] S. M. Candel and T. Poinso. Flame stretch and the balance equation for the flame surface area. *Combustion Science and Technology*, 70 :1–15, 1990.
- [33] K. Canneviere. *Simulation numérique directe de la combustion turbulente diphasique : application à l’étude de la propagation et de la structure des flammes*. PhD thesis, INSA Rouen, 2003.
- [34] Cantera. D.g. goodwin, 2009. www.cantera.org (version 1.8.0).
- [35] J. Caudal, B. Fiorina, M. Massot, B. Labégorre, N. Darabiha, and O. Gicquel. Characteristic chemical time scales identification in reactive flows. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1) :1357–1364, 2013.

- [36] S. Chapman and T. G. Cowling. *The mathematical theory of non uniform gases*. Cambridge University Press, Cambridge, 1970.
- [37] H. Chen, E. Weigert, J. Fedeyko, J. Cox, and P. Andersen. Advanced catalysts for combined (nac+scr) emissioncontrol systems. *SAE-2010-01-0302*, 2010.
- [38] S. Choi, W. Park, S. Lee, K. Min, and H. Choi. Methods for in-cylinder egr stratification and its effects on combustion and emission characteristics in a diesel engine. *Energy*, 36 :6948–6959, 2011.
- [39] A. J. Chorin. Numerical solution of the navier-stokes equations. *Mathematics of computation*, 22(104) :745–762, 1968.
- [40] S. H. Chung and C. K. Law. An invariant derivation of flame stretch. *Combustion and Flame*, 55(1) :123–125, 1984.
- [41] T. P. Coffee. Kinetic mechanisms for premixed, laminar, steady state methane/air flames. *Combustion and Flame*, 55 :161–170, 1984.
- [42] S. D. Cohen and A. C. Hindmarsh. Cvode, a stiff/nonstiff ode solver in c. *SciCADE95, Stanford University*, 1995.
- [43] G. Colin. *Contrôle des systèmes rapides non linéaires. Application au moteur à allumage commandé turbocompressé à distribution variable*. PhD thesis, Université d’Orléans, 2006.
- [44] A. Pires Da Cruz, A. M. Dean, and J. M. Grenda. A numerical study of the laminar flame speed of stratified methane/air flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :1925–1932, 2000.
- [45] H. J. Curran Curan, T. M. Jayaweera, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook. A detailed modeling study of propane oxidation. *Western States Section of the Combustion Institute*, 2004.
- [46] O. Dégardin, B. Renou, and A. M. Boukhalfa. Simultaneous measurement of temperature and fuel mole fraction using acetone planar induced fluorescence and rayleigh scattering in stratified flames. *Experiments in Fluids*, 40 :452–463, 2006.
- [47] H. A. Van der Vorst. Parallel iterative solution method for linear systems arising from discretized pde’s. In *Special course on parallel computing in CFD*, pages 1–39.
- [48] B. Deshaies and G. Joulin. On the initiation of a spherical flame kernel. *Combustion Science and Technology*, 37(3-4) :99–116, 1984.
- [49] P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante. Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, 152 :415–432, 2008.
- [50] M. Dong, G. Chen, M. Xu, and C. Daniels. A preliminary cfd investigation of in-cylinder stratified egr for spark ignition engines. *SAE-2002-01-1734*, 2002.
- [51] C. Duwig and C. Fureby. Large eddy simulation of unsteady lean stratified premixed combustion. *Combustion and Flame*, 151 :85–103, 2007.
- [52] F. N. Egolfopoulos, P. Cho, and C. K. Law. Laminar flame speeds of methane-air mixtures under reduced and elevated pressures. *Combustion and Flame*, 76(3-4) :375–391, 1989.
- [53] A. Ern and V. Giovangigli. *Multicomponent transport algorithms*. Springer Verlag, Heidelberg, 1994.
- [54] A. Van Tiggelen et coll. *Oxydations et combustions*. Editions TECHNIP., 1968.
- [55] J. H. Ferziger and T. Echehki. A simplified reaction rate model and its application to the analysis of premixed flames. *Combustion Science and Technology*, 89 :293–315, 1993.

- [56] B. Fiorina, R. Baron, O. Gicquel, D. Thévenin, S. Carpentier, and N. Darabiha. Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ildm. *Combustion Theory and Modelling*, 7 :3 :449–470, 2003.
- [57] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using fpi flamelet tabulation. *Combustion and Flame*, 140 :147–160, 2005.
- [58] B. Fiorina, R. Vicquelin, P. Auzillon, N. Darabiha, O. Gicquel, and D. Veynante. A filtered tabulated chemistry model for les of premixed combustion. *Combustion and Flame*, 157 :465–475, 2010.
- [59] C. Fureby. A fractal flame-wrinkling large eddy simulation model for premixed turbulent combustion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :593–601, 2005.
- [60] C. Galizzi and D. Escudié. Experimental analysis of an oblique laminar flame front propagating in a stratified flow. *Combustion and Flame*, 145 :621–634, 2006.
- [61] J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, and P. Domingo. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burnel. *Combustion and Flame*, 155 :247–266, 2008.
- [62] D. Garrido-Lopez and S. Sarkar. Effects of imperfect premixing coupled with hydrodynamic instability on flame propagation. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :621–628, 2005.
- [63] M. Germano, U. Piomelli, and P. Moin ad W. H. Cabot. A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model. *Phys. of Fluids*, 7, 1991.
- [64] P. Giansetti. *Contrôle moteur à allumage commandé. Estimation/prédiction de la masse et de la composition du mélange enfermé dans le cylindre*. PhD thesis, Université d’Orléans, 2005.
- [65] L. Y. M. Gicquel, N. Gourdain, J.-F. Boussuge, H. Deniau, G. Staffelbach, P. Wolf, and T. Poinso. High performance parallel computing of flows in complex geometries. *Comptes Rendus Mécanique*, 339, 104-124 2011.
- [66] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin. Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :1901–1908, 2000.
- [67] R. G. Gilbert, K. Luther, and J. Troe. Theory of thermal unimolecular reactions in the fall-off range. ii. weak collision rate constants”. *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, 87 :169–177, 1983.
- [68] V. Giovangigli. *Multicomponent Flow Modeling*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Birkhauser, Boston, 1999.
- [69] P. Girard, M. Huneau, C. Rabasse, and J. C. Leyer. Flame propagation through unconfined and confined hemispherical stratified gaseous mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 17 :1247–1255, 1979.
- [70] S. S. Girimaji. Assumed beta pdf model for turbulent mixing : Validation and extension to multiple scalar mixing. *Combustion Science and Technology*, 78 :177–196, 1991.
- [71] S. Gordon and B. J. McBride. Computer program for calculation of complex chemical equilibrium compositions, rocket performance, incident and reflected shocks and chapman-jouguet detonations. Technical report, NASA Report SP-273, 1971.
- [72] G. R. A. Groot and L. P. H. de Goey. A computational study on propagation spherical and cylindrical premixed flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29, 2002.

- [73] W. N. Groves and M. Bjorkhaug. Stratified exhaust gas recirculation in a s.i. engine. *SAE 860318*, 1986.
- [74] X. J. Gu, M. Z. Haq, M. Lawes, and R. Woolley. Laminar burning velocity and markstein lengths of methane-air mixtures. *Combustion and Flame*, 121 :41–58, 2000.
- [75] C. Hasse, M. Bollig, and N. Peters. Quenching of laminar iso-octane flames at cold walls. *Combustion and Flame*, 122 :117–129, 2000.
- [76] E. R. Hawkes, R. Samkaran, P. P. Pébay, and J. H. Chen. Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities ii. parametric study. *Combustion and Flame*, 145 :145–159, 2006.
- [77] D. C. Haworth, R. J. Blint, B. Cuenot, and T. J. Poinsot. Numerical simulation of turbulent propane-air combustion with nonhomogeneous reactants. *Combustion and Flame*, 121((3)) :395–417, 2000.
- [78] M. Hedge, P. Weber, J. Gingrich, T. Alger, and I. Khalek. Effect of egr on particle emissions from a gdi engine. *SAE-2011-01-0636*, 2011.
- [79] J. Hélie and A. Trouvé. Turbulent flame propagation in partially premixed combustion. *Symposium (International) on Combustion*, 1 :891–898, 1998.
- [80] J. Hélie and A. Trouvé. A modified coherent flame model to describe turbulent flame propagation in mixtures with variable composition. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :193–201, 2000.
- [81] O. Herbinet, W. J. Pitz, and C. K. Westbrook. Detailed chemical kinetic oxidation mechanism for a biodiesel surrogate. *Combustion and Flame*, 154 :507–528, 2008.
- [82] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley and Sons, New York, 1969.
- [83] J. C. R. Hunt, A. A. Wray, and P. Moin. Eddies, streams, and convergence zones in turbulent flows. *Center for Turbulence Research, Proceedings of the summer programm*, pages 193–208, 1988.
- [84] N. Ishikawa. Combustion of stratified methane/air layers. *Combustion Science and Technology*, 30(1-6) :311–325, 1983.
- [85] M. Jangi, R. Yu, and X. S. Bai. A multi-zone chemistry mapping approach for direct numerical simulation of auto-ignition and flame propagation in a constant volume enclosure. *Combustion Theory and Modelling*, 16 :221–249, 2011.
- [86] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, and H. Pitsch. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combustion and Flame*, 156 :292–301, 2009.
- [87] C. Jimenez, B. Cuenot, and T. J. Poinsot. Numerical simulation and modeling for lean stratified propane-air flames. *Combustion and Flame*, 128((1-2)) :1–21, 2002.
- [88] G. Jomaas, X. L. Zheng, D. L. Zhu, and C. K. Law. Experimental determination of counterflow ignition temperatures and laminar flame speeds of c2-c3 hydrocarbons at atmospheric and elevated pressures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :193–200, 2005.
- [89] G. Joulin. Point-sourcde initiation of lean spherical flames of light reactants : an asymptotic theory. *Combustion Science and Technology*, 43(1-2) :99–113, 1985.
- [90] T. Kang and D. C. Kyritsis. A combined experimental/computational investigation of stratified combustion in methane-air mixtures. *Energy Conversion and Management*, 48 :2769–2774, 2007.

- [91] T. Kang and D. C. Kyritsis. Departure from quasi-homogeneity during laminar flame propagation in lean, compositionally stratified methane-air mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1075–1083, 2007a.
- [92] T. Kang and D. C. Kyritsis. Phenomenology of methane flame propagation into compositionally stratified, gradually richer mixtures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :979–985, 2009.
- [93] J. Kim and P. Moin. Application of a fractional-step method to incompressible navier-stokes equations. *Journal of Computational Physics*, 59(2) :308–323, 1985.
- [94] K. Kim and K. S. Shin. Shock tube and modeling study of the ignition of propane. *Bull. Korean Chem. Soc.*, 22 :303–307, 2001.
- [95] E. Knudsen, S. H. Kim, and H. Pitsch. An analysis of premixed flamelet models for large eddy simulation of turbulent combustion. *Phys. of Fluids*, 22, 2010.
- [96] Y. Ko, R. W. Anderson, and V. S. Arpaci. Spark ignition of propane-air mixtures near the minimum ignition energy : Part 1. an experimental study. *Combustion and Flame*, 83 :75–87, 1991.
- [97] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence incompressible viscous fluid for very large reynolds number. *C. R. Acad. Sci. USSR*, 30 (301), 1941.
- [98] M. Kraushaar. *Application of the compressible and Low-Mach number approaches to large-eddy simulation of turbulent flows in aero-engines*. PhD thesis, Université de Toulouse, 2011.
- [99] A. Kronenburg, R. W. Bilger, and J. H. Kent. Second-order conditional moment closure for turbulent jet diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, 27 :1097–1104, 1998.
- [100] G. Kuenne, A. Ketelheun, and J. Janicka. Les modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with fgm tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, 158 :1750–1767, 2011.
- [101] G. Kuenne, F. Seffrin, F. Fuest, T. Stahler, A. Ketelheun, D. Geyer, J. Janicka, and A. Dreizler. Experimental and numerical analysis of a lean premixed stratified burner using 1d raman/rayleigh scattering and large eddy simulation. *Combustion and Flame*, 159 :2669–2689, 2012.
- [102] J. Kummer. Oxidation of co and c2h4 by base metal catalysts for honeycomb substrates. *ACS series 143, Catalyst for the control of automotive pollutants. J. McECOY ed., American Chemical Society*, pages 178–192, 1975.
- [103] K. K. Kuo. *Principles of combustion*. John Wiley and Sons, Inc, Hoboken, New Jersey, 2005 Second Edition.
- [104] B. Lecordier. *Etude de l'interaction de la propagation d'une flamme prémélangée avec la champ aérodynamique par association de la tomographie laser et de la vélocimétrie par images de particules*. PhD thesis, 1997.
- [105] J.-P. L egier, T. Poinso, and D. Veynante. Dynamically thickened flame large eddy simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion. *Proceedings of the Summer Programm, Center for turbulent research, Stanford university*, pages 157–168, 2000.
- [106] T. Leroy. *Cylinder Filling Control of Variable-Valve-Actuation equipped Internal Combustion Engines*. PhD thesis, Ecole nationale sup erieur des mines de Paris, 2010.

- [107] M. Lesieur. Recent approaches in large-eddy simulation of turbulence. *New tools in turbulence modelling*, pages 1–28, 1997.
- [108] A. Linan and F. A. Williams. *Fundamental aspects of combustion*. Oxford University Press, 1993.
- [109] F. A. Lindemann, S. Arrhenius, I. Langmuir, N. R. Dhar, J. Perrin, and W. C. McC. Lewis. Discussion on "the radiation theory of chemical action". *Transactions of the Faraday Society*, 17 :598–606, 1922.
- [110] T. Lu and C. K. Law. A directed relation graph method for mechanism reduction. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1333-1341), 2005.
- [111] U. Maas and S. Pope. Simplifying chemical kinetics-intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and Flame*, 88 (3-4)(239-264), 1992.
- [112] H. T. C. Machacon, S. Shiga, T. Karasawa, and H. Nakamura. Effect of egr on the particulate and its component emissions in a d.i. diesel engine. *Journal of MESJ*, 3, 1996.
- [113] A. Maiboom, X. Tautzia, and J-F. Hétet. Experimental study of various effects of exhaust gas recirculation (egr) on combustion and emissions of an automotive direct injection diesel engine. *Energy*, 33 :22–34, 2008.
- [114] A. Majda and J. Sethian. The derivation and numerical solution of the equation for zero mach number combustion. *Combustion Science and Technology*, 42 :185–205, 1985.
- [115] R. Maly and M. Vogel. Initiation and propagation of flame fronts in lean ch₄-air mixtures by the three modes of the ignition spark. *Symposium (International) on Combustion*, 17(1) :821–831, 1979.
- [116] E. Marble and J. E. Broadwell. *The coherent flame model for turbulent chemical reactions*. DTIC Document, 1977.
- [117] S. K. Marley and W. L. Roberts. Measurements of laminar burning velocity and markstein number using high-speed chemiluminescence imaging. *Combustion and Flame*, 141 :473–477, 2005.
- [118] R. L. Martelli, C. Warren, and W. F. Stockhausen. *Stratified Exhaust Residual Engine*. US Patent, 5,918,577.
- [119] Y. M. Marzouk, A. F. Ghoniem, and H. N. Najm. Dynamic response of strained premixed flames to equivalence ratio gradients. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :1859–1866, 2000.
- [120] E. A. Mason and L. Monchick. Transport properties of polar gases. *Journal of Chemical Physics*, 35 :1676–1697, 1961.
- [121] M. Matalon and B. J. Matkowsky. Flames as gasdynamic discontinuities. *Journal of Fluid Mechanics*, pages 124–239, 1982.
- [122] S. Mathur, P. K. Tandon, and S. C. Saxena. Thermal conductivity of binary, ternary and quaternary mixtures of rare gases. *Molecular Physics*, 12 :569, 1967.
- [123] J.-B. Michel, O. Colin, C. Angelberger, and D. Veynante. Using the tabulated diffusion flamelet model adf-pcm to simulate a lifted methane-air jet flame. *Combustion and Flame*, pages 1318–1331, 2009.
- [124] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. Design of a massively parallel cfd code for complex geometries. *C. R. Mecanique*, (2/3) :141–148, 339.
- [125] P. M. Najt and D. E. Foster. Compression-ignited homogeneous charge combustion. Technical report, 1983.

- [126] S. K. Nambully. *A filtered-laminar-flame PDF subgrid scale closure for LES of Premixed Turbulent Flames. Application to a Stratified Bluff-Body burner with Differential Diffusion*. PhD thesis, INSA Rouen, 2013.
- [127] P-D Nguyen, L. Vervisch, V. Subramanian, and P. Domingo. Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion. *Combustion and Flame*, 157 :43–61, 2010.
- [128] R. Nicolaides. Deflation of conjugate gradients with applications to boundary value problems. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 24(2) :335–365, 1987.
- [129] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turb. Combust.*, 62 :183–200, 1999.
- [130] J. A. Van Oijen and L. P. H. de Goey. Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combustion Science and Technology*, 161 :113–137, 2000.
- [131] M. Olsson and L. Fuchs. Large eddy simulation of the proximal region of a spatially developing circular jet. *Phys. of Fluids*, 8 :2125–2137, 1996.
- [132] S. Osher and R. Fedkiw. Level set methods and dynamic implicit surfaces. *Applied Mathematical Sciences*, 153, 2003.
- [133] N. Pasquier, B. Lecordier, M. Trinité, and A. Cessou. An experimental investigation of flame propagation through a turbulent stratified mixture. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :1567–1574, 2007.
- [134] T. Passot and A. Pouquet. Numerical simulation of compressible homogeneous flows in the turbulent regime. *Journal of Fluid Mechanics*, 181 :441–466, 1987.
- [135] P. Pepiot-Desjardins and H. Pitsch. An automatic lumping method for the reduction of large chemical kinetic mechanisms. *Combustion Theory and Modelling*, 12(6) :1089–1108, 2008.
- [136] P. Pepiot-Desjardins and H. Pitsch. An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms. *Combustion and Flame*, 154 :67–81, 2008.
- [137] C. Pera, S. Chevillard, and J. Réveillon. Effects of residual burnt gas heterogeneity on early flame propagation and on cyclic variability in spark-ignited engines. *Combustion and Flame*, 2013.
- [138] C. Pera, J. Réveillon, L. Vervisch, and P. Domingo. Modeling subgrid scale mixture fraction variance in LES of evaporating spray. *Combustion and Flame*, 146 :635–648, 2006.
- [139] N. Peters. Numerical and asymptotic analysis of systematically reduced reaction schemes for hydrocarbon flames. *Lecture Note in Physics*, 241 :90–109, 1985.
- [140] N. Peters. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. *21st Symposium (Int.) on Combustion, The Combustion Institute*, pages 1231–1250, 1986.
- [141] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384(-1) :107–132, 1999.
- [142] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [143] N. Peters and J. Warnatz. *Numerical methods in laminar flame propagation*. Friedr. Vieweg and Sohn, Wiesbaden, W. Germany, 1982.
- [144] C. D. Pierce and P. Moin. Progress-variable approach for large-eddy simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 504 :73–97, 2004.
- [145] U. Piomelli and J. Chasnov. Large eddy simulation : theory and applications. *Turbulence and Transition modelling*, pages 269–236, 1996.

- [146] A. PipereL. *Impact des propriétés des gaz d'échappement recyclés sur l'initiation et le déroulement de la combustion : caractérisation paramétrique de la réactivité de l'EGR*. PhD thesis, Université d'Orléans, 2008.
- [147] H. Pitsch. A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combustion and Flame*, 143 :587–598, 2005.
- [148] H. Pitsch. Large eddy simulation of turbulent combustion. *Annu. Rev. Fluid. Mech.*, 38 :453–482, 2006.
- [149] T. PoinsoT and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.
- [150] T. J. PoinsoT, D. Veynante, A. Trouvé, and G. Ruetsch. Turbulent flame propagation in partially premixed flames. *Proceedings of the Summer Programm.*, Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford University :111, 1996.
- [151] S. B. Pope. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1 :41–63, 1997.
- [152] C. Preussner, C. Doring, S. Fehler, and S. Kampmann. Gdi : Interaction between mixture preparation, combustion system and injector performance. *SAE 980498*, 1998.
- [153] Y. Ra. *Laminar flame propagation in a stratified charge*. PhD thesis, Massachusetts Institute of Technology, 1999.
- [154] W. J. S. Ramaekers, J. A. Van Oijen, and L. P. H. de Goey. Stratified turbulent bunsen flames : flame surface analysis and flame surface density modelling. *Combustion Theory and Modelling*, 16(6) :943–975, 2012.
- [155] J. Réveillon. *Simulation dynamique des grandes structures appliquée aux flammes turbulentes non-prémélangées*. PhD thesis, Université de Rouen, 1996.
- [156] G. Ribert, O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Veynante. Tabulation of complex chemistry based on self-similar behavior of laminar premixed flames. *Combustion and Flame*, 146 :649–664, 2006.
- [157] E. S. Richardson, V. E. Granet, A. Eyssartier, and J. H. Chen. Effects of equivalence ratio variation on lean, stratified methane-air laminar counterflow flames. *Combustion Theory and Modelling*, 14(6) :775–792, 2010.
- [158] L. F. Richardson. *Weather prediction by numerical process*. Cambridge University Press, 1922.
- [159] M-C. Rivara. Mesh refinement processes based on the generalized bisection of simplices. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21(3) :604–613, 1984.
- [160] V. Robin, A. Mura, M. Champion, O. Degardin, B. Renou, and M. Boukhalfa. Experimental and numerical analysis of stratified turbulent v-shaped flames. *Combustion and Flame*, 153 :288–315, 2008.
- [161] V. Robin, A. Mura, M. Champion, and P. Plion. A multi-dirac presumed pdf model for turbulent reactive flows with variable equivalence ratio. *Combustion Science and Technology*, 178 :1843–1870, 2006.
- [162] A. Roux and H. Pitsch. Large-eddy simulation of stratified combustion. *Center for Turbulence Research, Annual Research Briefs*, 2010.
- [163] S. Roux. *Influence de la modélisation du mélange air/carburant et de l'étendue du domaine de calcul dans la simulation aux grandes échelles des instabilités de combustions. Application à des foyers aéronautiques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.

- [164] G. Rozenschan, D. L. Zhu, C. K. Law, and S. D. Tse. Outward propagation, burning velocities and chemical effects of methane flames up to 60 atm. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :1461–1469, 2002.
- [165] G. .R. Ruetsch, L. Vervisch, and A. Linan. Effects of heat release on triple flames. *Phys. of Fluids*, 7(6) :1447–1454, 1995.
- [166] P. Sagaut. *Large eddy simulation for incompressible flows*. Springer Verlag, 2000.
- [167] W. Salber, P. Wolters, T. Esch, and J. Dilthey. Synergies of variable valve actuation and direct injection. *SAE-2002-01-0706*, 2002.
- [168] A. Sassi, E. Rohart, and G. Belot. Post-traitement des émissions polluantes des moteurs thermiques à combustion interne - moteurs à allumage commandé. Technical report, Techniques de l'ingénieur, 2011.
- [169] A. Sassi, E. Rohart, and G. Belot. Post-traitement des émissions polluantes des moteurs thermiques à combustion interne - moteurs à allumage par compression. Technical report, Techniques de l'ingénieur, 2011.
- [170] C. Schwarz, E. Schünemann, B. Durst, J. Fisher, and A. Witt. Potentials of the spray-guided bmw di combustion system. *SAE-2006-01-1265*, 2006.
- [171] F. Seffrin, F. Fuest, D. Geyer, and A. Dreizler. Flow field studies of a new series of turbulent premixed stratified flames. *Combustion and Flame*, 157 :384–396, 2010.
- [172] A. X. Sengissen, J. F. Van Kampen, R. A. Huls, G. G. M. Stoffels, J. B. W. Kok, and T. J. Poinot. Les and experimental studies of cold and reacting flow in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combustion and Flame*, 150(40-53), 2007.
- [173] J. Smagorinsky. Gernerl circulation experiments with primitive equations. *Mon. Weather Rev.*, 61 :99–164, 1963.
- [174] R. Stanglmaier and C. Roberts. Homogeneous charge compression ignition (hcci) : Benefits, compromises, and future engine applications. *SAE-1999-01-3682*, 1999.
- [175] R. Stone and A. Clarke. Correlations for the laminar-burning velocity of methane/diluent/air mixtures obtaines in free-fall experiments. *Combustion and Flame*, 114((3-4)) :546–555, 1998.
- [176] V. Subramanian, P. Domingo, and L. Vervisch. Large eddy simulation of forced ignition of an annular bluff-body burner. *Combustion and Flame*, 157 :579–601, 2010.
- [177] M. S. Sweeney, S. Hochgreb, M. J. Dunn, and R. S. Barlow. The structure of turbulent stratified and premixed methane/air flames i : Non-swirling flows. *Combustion and Flame*, 159 :2896–2911, 2012.
- [178] M. S. Sweeney, S. Hochgreb, M. J. Dunn, and R. S. Barlow. The structure of turbulent stratified and premixed methane/air flames ii : Swirling flows. *Combustion and Flame*, 159 :2912–2929, 2012.
- [179] M. S. Sweeney, S. Hochgreb, M. J. Dunn, and R. S. Barlow. Multiply conditioned analyses of stratification in highly swirling methane/air flames. *Combustion and Flame*, 160 :322–334, 2013.
- [180] J. Theis, J. Ura, and R. McCabe. The effects of sulfur poisoning and desulfation temperature on the nox conversion of lnt+scr systems for diesel applications. *SAE-2010-01-0300*, 2010.

- [181] O. Thomine. *Développement de méthodes multi-échelles pour la simulation numérique des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, Université de Rouen, 2011.
- [182] N. S. Titova, P. S. Kuleshov, and A. M. Starik. Kinetic mechanism of propane ignition and combustion in air. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, 47(3) :249–264, 2011.
- [183] K. Truffin. *Simulation aux grandes échelles et identification acoustique des turbines à gaz en régime partiellement prémélangé*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2005.
- [184] T. Turanyi. Reduction of large reaction mechanism. *New J. Chem*, 14 :795–803, 1990.
- [185] S. R. Turns. *An introduction to combustion : Concepts and Applications*. Mc Graw-Hill, New York, 1996.
- [186] C. M. Vagelopoulos and F. N. Egolfopoulos. Direct experimental determination of laminar flame speeds. *Proceedings of the Combustion Institute*, 27 :513–519, 1998.
- [187] C. M. Vagelopoulos, F. N. Egolfopoulos, and C. K. Law. Further considerations on the determination of laminar flame speeds with the counterflow twin flame technique. *Proceedings of the Combustion Institute*, 25 :1341–1347, 1994.
- [188] B. A. VanDerWege, Z. Han, C. O. Iyer, and R. H. Munoz and J. Yi. Development and analysis of a spray-guided diesel combustion system concept. *SAE-2003-3105*, 2003.
- [189] S. Vantieghem. *Numerical simulations of quasi-static magnetohydrodynamics using an unstructured finite volume solver : development and applications*. PhD thesis, Université libre de Bruxelles, 2011.
- [190] P. C. Vena, B. Deschamps, G. J. Smallwood, and M. R. Johnson. Equivalence ratio gradient effects on flame front topology in a stratified iso-octane/air turbulent v-flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :1551–1558, 2011.
- [191] L. Vervisch. Study and modeling of finite rate chemistry effects in turbulent non-premixed flames. *Annual Research Briefs, Center for Turbulence Research*, 94 :411–431, 1992.
- [192] L. Vervisch, R. Hauguel, P. Domingo, and M. Rullaud. Three facets of turbulent combustion modelling : Dns of premixed v-flame, les of lifted nonpremixed flame and rans of jet-flame. *Journal of Turbulence*, 5, 2004.
- [193] L. Vervisch and D. Veynante. Interlinks between approaches for modeling turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :175–183, 2000.
- [194] D. Veynante and T. Poinsot. Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion. *New tools in turbulence modelling*, pages 105–140, 1997.
- [195] A. W. Vreman. An eddy-viscosity subgrid-scale model for turbulent shear flow : Algebraic theory and applications. *Phys. of Fluids*, 16(10), 2004.
- [196] L. Waldmann. *Transportscheinungen in Gasen von Mittlerem Druck*. Handbuch der Physik, S. Flügge, Ed., 12, Springer-Verlag, Berlin, pp. 295-514, 1958.
- [197] L. Waldmann and E. Trübenbacher. Formale kinetische theorie von gasgemischen aus anregbaren molekülen. *Zeitschr. Naturforsch.*, 17a :363–376, 1962.
- [198] J. Warnatz. The structure of laminar alkane-, alkene-, and acetylene flames. *Symposium (International) on Combustion*, 18 :369–384, 1981.
- [199] M. Weis and N. Zarzalis. Model, software development for calculation of markstein numbers and minimum ignition energies. Technical report, Safinex, 2004.

- [200] M. Weis and N. Zarzalis. Calculation of markstein numbers, their influence on the minimum ignition energy and implementation of practical software. Technical report, Safinex, 2006.
- [201] C. K. Westbrook, W. J. Pitz, O. Herbinet, H. J. Curran, and E. J. Silke. A comprehensive detailed chemical kinetic reaction mechanism for combustion of n-alkane hydrocarbons from n-octane to n-hexadecane. *Combustion and Flame*, 156 :181–199, 2009.
- [202] F. Williams. *Combustion theory (2nd Ed.)*. Addison-Wesley, 1985.
- [203] F. A. Williams. Turbulent combustion. *The mathematics of combustion*, pages 97–131, 1985.
- [204] L. Xu, R. McCabe, M. Dearth, and W. Ruona. Laboratory and vehicle demonstration of "2nd-generation" Int+in-situ scr diesel nox emission control systems. *SAE-2010-01-0305*, 2010.
- [205] B. Yang and S. B. Pope. Treating chemistry in combustion with detailed mechanisms - in situ adaptive tabulation in principal directions - premixed combustion. *Combustion and Flame*, 112 :85–112, 1998.
- [206] C. S. Yoo, Z. Luo, T. Lu, H. Kim, and J. H. Chen. A dns study of ignition characteristics of a lean iso-octane/air mixture under hcci and saci conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34 :2985–2993, 2013.
- [207] R. Zhou and S. Hochgreb. The behaviour of laminar stratified methane/air flames in counterflow. *Combustion and Flame*, 160 :1070–1082, 2013.