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

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

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

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

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

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

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



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

4.6 Discussion et développement

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

4.6.1 Validité des simulations DNS utilisées

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

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



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

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

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

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

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

4.6.2 D'autres restrictions liées aux calculs DNS

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



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

Chimie à une ou à plusieurs étapes

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

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

Influence du cisaillement

Le cisaillement est une caractéristique importante d'un écoulement turbulent. L'étirement, dont nous avons discuté les effets sur une flamme dans la section 2.4, est le résultat sur la flamme de l'action du cisaillement. Il est fortement incrémenté en présence des structures turbulentes. Le cisaillement constitue une source d'instabilités qui impliquent le passage de l'écoulement de la situation laminaire à la situation turbulente. Dans un moteur Diesel, quand le carburant est injecté dans la chambre de combustion à des vitesses très élevées, un fort cisaillement est généré. Il est responsable d'une partie importante de la turbulence présente dans la chambre.

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

Chapitre 5

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

5.1 Introduction

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

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

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

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

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

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

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

	DNS	Modèle - DNS	Modèle - KIVA	
$\widetilde{Z}, \widetilde{Z^{"2}}, \widetilde{Y}_F$	Mesurées (moyennes)	Mesurées	Modélisées	
\overline{c}	Calculée	Modélisée	Modélisée	
$P\left(Z\right)$	Mesurée	$\Pr{ésumée}$	Présumée	
$P\left(c ight)$	Mesurée	$\Pr{ésumée}$	Présumée	
$Y_{F,eq}$	Mesurée	Calculée (analyse asymp- totique Cuenot et Liñan)	Calculée (hypothèse de Burke-Schumann de chimie infiniment rapide)	
$\overline{\dot{\omega}}$	Mesuré	$\operatorname{Mod}\acute{\mathrm{e}}\mathrm{lis}\acute{\mathrm{e}}$	$\operatorname{Mod}\acute{e}$ lisé	
$f\left(\overline{c} ight)$	Mesurée	Calculée par rapport à la DNS	Calculée en fonction de \bar{c}	

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

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

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

5.2 Tests 1D

5.2.1 Description du problème

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

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



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

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

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

$$D_t = \frac{C_\mu}{S_c} \frac{k^2}{\epsilon} \tag{5.1}$$

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

$$\epsilon = 0.42 \frac{k^{\frac{3}{2}}}{l_t} \tag{5.2}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Sensibilité par rapport au pas de temps de calcul

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

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

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

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



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

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

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

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

Initialisation de $\widetilde{Z^{"2}}$

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

La variance de la fraction de mélange doit être calculée de façon cohérente par rapport à l'initialisation du profil de fraction de mélange. Pour calculer sa valeur initiale, il aurait fallu connaître davantage l'état du mélange à l'instant initial de calcul. Or, ceci n'est pas possible, car nous ne pouvons pas résoudre analytiquement l'équation moyennée de transport de $Z^{"2}$

²Selon Williams [18], le temps chimique de référence pour un système initialement non prémélangé dont l'oxydant est la source chaude est $\tau_{ref} = (AY_{F,0}Y_{O,0} \exp(-T_a/T_{O,0}))^{-1}$.



Figure 5.3 : Sensibilité du modèle PDFA/CHI par rapport au pas de temps de calcul. La densité partielle de carburant et la température ont été suivies sur une maille au centre du domaine de calcul à environ $\tilde{Z} = 0.5$.



Figure 5.4 : Variance de la fraction de mélange pour $t = t_0$ et du taux de réaction moyen global, en fonction du nombre de mailles dans le profil initial de \tilde{Z} .

comme nous l'avons fait pour l'équation de transport de Z^3 . Nous savons seulement que $\overline{Z^{22}}$ ne peut varier qu'entre deux bornes bien définies représentant chacune des situations physiques distinctes:

- La limite inférieure de $\widetilde{Z^{2}}$ est la valeur nulle, ce qui implique que $Z(\widetilde{1-Z}) = \tilde{Z}(1-\tilde{Z})$ et donc que partout où l'oxydant et le carburant sont en présence un de l'autre, ils sont parfaitement mélangés. Ceci correspond à la situation laminaire ce qui implique que la turbulence est dans ce cas négligée jusqu'au début de la simulation. C'est la situation étudiée dans la DNS.
- L'autre possibilité est d'attribuer à la variance initiale sa valeur maximale. Celle-ci est donnée par $\widetilde{Z^{"2}}_{max} = \tilde{Z} \left(1 \tilde{Z}\right)$ ce qui est représentatif d'un écoulement intermittent entre deux espèces non mélangées. La diffusion laminaire est dans ce cas négligée devant les fluctuations de l'écoulement turbulent.

Comme il n'est pas possible de connaître, dans l'intervalle $[0, \tilde{Z}(1-\tilde{Z})]$, la valeur la plus adaptée au problème en étude, nous avons étudié les deux cas extrêmes.

Les résultats présentés sur la figure 5.5 montrent que le changement de $\widetilde{Z^{"2}}$ initiale ne modifie le comportement de l'auto-allumage que dans les cas où le mélange initial est nul (ou de façon équivalente, $\widetilde{Z^{"2}} = \tilde{Z} \left(1 - \tilde{Z}\right)$). En effet, quand le système part d'une configuration où F et

³Rappelons que le mélange non réactif peut être calculé par $Z(\widetilde{1-Z}) = \tilde{Z}(1-\tilde{Z}) - \widetilde{Z^{*2}}$.

O sont pour $t = t_0$ complètement mélangés, la turbulence n'a pas le temps d'intervenir et par rapport au délai d'auto-allumage, tout se passe comme s'il s'agissait d'une configuration laminaire (aussi représentée sur la figure 5.5).



Figure 5.5 : Comportement du taux de réaction pendant la période d'auto-inflammation en fonction de l'initialisation de $\widetilde{Z^{"2}}$ et des paramètres turbulents. Comparaison avec un modèle d'auto-inflammation cinétique laminaire (Arrhenius 1 étape).

La question est donc de savoir laquelle des deux configurations est la plus réaliste dans un moteur. Sachant que la turbulence joue un rôle important dans la chambre de combustion d'un moteur Diesel, il ne paraît pas logique de considérer $\widetilde{Z''}^2 = 0$ en début de calcul. Dans une moyenne cyclique, comme celle qui est effectuée dans KIVA II (les grandeurs moyennes sont calculées sur l'ensemble des cycles moteurs), il est plus facile d'admettre l'intermittence de la concentration des espèces cycle à cycle que son invariabilité totale. La solution $\widetilde{Z''}^2 = \tilde{Z} \left(1 - \tilde{Z}\right)$ pour le temps de calcul $t = t_0$ a donc été choisie pour les calculs qui suivent.

Sensibilité par rapport aux grandeurs turbulentes k et l_t

Le tableau 5.3 présente la liste des différents cas étudiés. La longueur intégrale l_t est le paramètre qui distingue les deux premiers cas des trois suivants. Pour chaque longueur intégrale considérée, l'énergie cinétique turbulente k a été changée. Nous rappelons que les délais d'auto-inflammation obtenus ne concernent aucun problème réel. Ils doivent servir comme repère pour la comparaison entre les différents cas turbulents. L'instant d'auto-inflammation a été défini au moment où le taux de réaction atteint 10% de sa valeur maximale.

La figure 5.6 représente graphiquement l'évolution des taux de réaction dans tout le domaine de calcul au cours du temps, ainsi que les iso-lignes de fraction de mélange ($\tilde{Z} = 0$ en haut et

cas	$k\left(cm^2s^{-2}\right)$	$l_{t}\left(cm ight)$	$\nu_t \left(cm^2 s^{-1} \right)$	$\epsilon/k \ (s^{-1})$	Re_t	$t_{al}(ms)$	${ar \omega}_{F,max}$
1	$1.5 imes 10^4$	0.05	1.31	1028	8.3	0.32	21.4
2	$3.0 imes 10^4$	0.05	1.86	1455	11.7	0.26	24.0
3	$3.0 imes 10^3$	0.1	1.17	230	7.4	0.66	13.1
4	$3.0 imes10^4$	0.1	3.71	727	23.5	0.41	19.3
5	$1.0 imes10^5$	0.1	6.77	1328	42.9	0.32	22.9

Tableau 5.3 : Les différents paramètres turbulents utilisés dans l'étude de sensibilité.

 $\ddot{Z} = 1$ en bas). Chaque profil $t = C_{te}$ correspond au domaine unidimensionnel en étude. Dans tous les cas, la séquence d'événements ayant lieu est la même:

- Mélange entre le carburant et l'oxydant avec des taux de réactions faibles.
- Début de l'auto-allumage avec une zone plus au moins longue en fonction de la turbulence.
- Auto-allumage avec une hausse importante du taux de réaction.

La consommation des réactifs dans les points où l'auto-allumage s'est produit est presque totale. En conséquence, le taux de réaction devient à nouveau très faible dans cette région. La flamme se propage alors vers les zones prémélangées riche et pauvre en consommant ainsi tout le mélange créé auparavant. Finalement, une flamme de diffusion s'établit à $\tilde{Z} = Z_{st}$ (pour le mélange entre l'heptane et l'oxygène, dans les concentrations indiquées, $Z_{st} = 0.062$). La figure 5.7 montre l'évolution dans le temps du taux de réaction moyen intégré sur tout le domaine.

La sensibilité du modèle par rapport à la variation des grandeurs turbulentes est illustrée sur les différentes images et courbes des figures 5.6 et 5.7 respectivement. Les conséquences de la variation des paramètres turbulents se font sentir autant sur les délais d'auto-inflammation que sur la forme de la zone de réaction.

Le paramètre contrôlant directement le délai d'auto-inflammation est l'étirement ϵ/k (tableau 5.3): L'augmentation de l'étirement fait diminuer le délai d'auto-inflammation. Ceci peut être expliqué par le fait que l'augmentation de l'étirement implique l'augmentation de la dissipation scalaire moyenne et en conséquence, la diminution de la variance de la fraction de mélange. Or, la réduction de la variance de la fraction de mélange plus importante et donc, des délais d'auto-allumage plus courts.

La forme de la zone de réaction est influencée par le niveau de diffusion turbulente. En augmentant celle-ci, le mélange est étalé dans le domaine, ce qui est confirmé par l'éloignement des iso-lignes de fraction de mélange. La comparaison entre les cas 1 et 2 et entre les cas 2 et 4 montre que le changement de l'énergie cinétique turbulente a un effet moins prononcé sur la largeur de la zone de réaction que celui de l'échelle intégrale. Ceci est expliqué par le fait que le coefficient de diffusion turbulent dépend linéairement de l'échelle intégrale, tandis que l'influence de l'énergie cinétique turbulente est en $k^{\frac{1}{2}}$,

$$D_t = \frac{C_{\mu}}{0.42Sc} k^{\frac{1}{2}} l_t \tag{5.4}$$



Figure 5.6 : Taux de réaction en fonction du temps, de la coordonnée x du domaine 1D, et des paramètres turbulents k et l_t . Les iso-lignes représentent la fraction de mélange moyenne \tilde{Z} .



Figure 5.7 : Evolution au cours du temps du taux de réaction moyen, intégré sur le domaine de calcul dans les différents cas turbulents.

Cette même dépendance existe dans le calcul de l'étirement,

$$\frac{\epsilon}{k} = 0.42 \frac{k^{\frac{1}{2}}}{l_t} \tag{5.5}$$

La figure 5.6 montre que même si la localisation spatiale du point d'allumage varie, la flamme s'allume toujours pour des valeurs de \tilde{Z} proches de 0.5, indépendamment de la turbulence. Les travaux de Liñan [20], de Liñan et Crespo [4] et de Mastorakos *et al.* [3] montrent que pour des conditions limites de température et de concentration fixées, l'allumage a toujours lieu à une valeur de la fraction de mélange bien définie, la fraction de mélange la plus réactive Z_{mr} . Cependant, lorsque il s'agit de l'écoulement moyen, il est possible que la valeur moyenne de la fraction de mélange sur le point d'allumage ne soit pas Z_{mr} . La figure 5.8, qui montre l'évolution de la forme de $P(Z = Z_{st})^4$ au cours du temps, confirme que dans les instants initiaux du calcul, avant l'allumage, la probabilité de trouver $Z = Z_{st}$ est en effet maximale pour $\tilde{Z} = 0.5$. La flamme s'allume donc en moyenne à $\tilde{Z} = 0.5$.

Avec des modèles d'auto-inflammation cinétiques et laminaires, du type Arrhenius simple, Zellat-Zeller [2] ou Shell [9], qui ne tiennent pas compte de la structure locale du mélange, l'allumage aura toujours lieu à $\tilde{Z} = Z_{mr}$.

5.2.3 Comparaison avec un modèle traditionnel

Les modèles utilisés pour les calculs du taux de réaction pendant la combustion dans un moteur Diesel sont des modèles cinétiques laminaires pour l'auto-inflammation, couplés ensuite avec des modèles algébriques, où le mélange carburant-oxydant est consommé selon un temps

⁴Pour le heptane, Z_{st} et Z_{mr} sont très proches ($Z_{st} = 0.062$).



Figure 5.8 : Evolution au cours du temps de la probabilité de trouver $Z = Z_{st}$ en fonction de \tilde{Z} . Configuration chimique du tableau 5.3 et turbulente du cas 1 du tableau 5.2.

caractéristique du système. Ce temps caractéristique peut être un temps turbulent comme k/ϵ (modèle de Magnussen et Hjertager [71]), ou la somme d'un temps chimique avec un temps turbulent (modèle de Kong *et al.* [74]). Dans KIVA II MB, le modèle d'auto-allumage est le modèle de Zellat-Zeller [2] et le modèle de combustion à haute température est le modèle de Magnussen et Hjertager.

Nous avons comparé les résultats obtenus avec le modèle PDFA/CHI et les résultats donnés par un modèle simplifié qui couple une expression d'Arrhenius simple (équation 5.3) pour l'autoinflammation au modèle de Magnussen et Hjertager pour la combustion à haute température (équation 2.67),

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

où A et B sont des constantes du modèle, r est le rapport stoechiométrique massique entre l'oxydant et le carburant et \tilde{Y}_P est la concentration massique des produits de la combustion (nous allons l'appeler par la suite, le modèle ARR/MAG). L'expression d'Arrhenius simple a été préférée par rapport au modèle de Zellat-Zeller car le modèle PDFA/CHI est basé sur un mécanisme de chimie simple. Le même schéma cinétique est ainsi utilisé dans les deux modèles. Les résultats sont présentés sur les figures 5.9 et 5.10.

Plusieurs différences de comportement sont observées entre les deux modèles:

• La continuité du taux de réaction dans le domaine entre les périodes d'allumage et d'établissement de la flamme de diffusion. La nature du modèle PDFA/CHI assure cette



Figure 5.9 : Evolution au cours du temps du taux de réaction moyen, intégré sur le domaine de calcul. $k = 1.5e^4 cm^2 s^{-2}$, $l_t = 0.05 cm$.



Figure 5.10 : Taux de réaction en fonction du temps dans le domaine de calcul. Comparaison entre les modèles PDFA/CHI et ARR/MAG. $k = 1.5e^4 cm^2 s^{-2}$, $l_t = 0.05 cm$.

continuité. Nous rappelons qu'il s'agissait d'une des conditions envisagées lors de sa conception. Au contraire, le critère de couplage entre les modèles d'Arrhenius et de Magnussen, basé sur une température de transition, ne peut pas garantir la continuité du taux de réaction. Avec le modèle ARR/MAG, le taux de réaction juste après l'autoinflammation est maximum à des endroits où il était auparavant très faible (figure 5.9). Ceci est dû certainement à une valeur non appropriée de la constante B liée à la concentration de produits. Ce dernier terme du modèle de Magnussen (équation 2.67) est le terme dominant juste après l'auto-inflammation.

- Les délais et la localisation de l'auto-inflammation. L'allumage laminaire caractéristique de la formule d'Arrhenius ne tient pas compte de l'état du mélange. Dès que dans la même maille de calcul, les concentrations moyennes d'oxydant et de carburant sont non nulles, alors les deux espèces sont censées être complètement mélangées. Le premier point d'allumage apparaît à $\tilde{Z} = Z_{mr}$, tel que prévu par les analyses de Liñan [20] et de Mastorakos *et al.* [3]. Avec le modèle PDFA/CHI, il faut attendre que les deux espèces se mélangent et atteignent les conditions pour que la combustion puisse avoir lieu. En ce qui concerne l'endroit où l'allumage se produit, nous avons vu que lors de l'auto-inflammation, $P(Z = Z_{st})$ est maximale à $\tilde{Z} = 0.5$ (figure 5.8).
- La forme de la zone de réaction après l'auto-inflammation pendant la phase de combustion prémélangée. Avec le modèle PDFA/CHI, la flamme est née à $\tilde{Z} = 0.5$ et se propage ensuite vers des valeurs de \tilde{Z} inférieures et supérieures à 0.5. Elle s'éteint au fur et à mesure que les réactifs sont consommés. Avec le modèle ARR/MAG, le taux de réaction est très élevé partout où il y a des produits de la combustion. Une fois de plus, une valeur non adaptée de la constante *B* de l'équation 2.67 peut être à l'origine de ce phénomène.

Enfin, nous constatons l'accord entre les taux de réaction caractéristiques de la flamme de diffusion établie. Il s'agit d'un résultat prévisible car la chimie devient proche de la situation infiniment rapide. Une fois la flamme de diffusion établie, le taux de réaction est contrôlé par le taux de mélange entre les réactifs, ce dont les deux modèles tiennent compte.

5.2.4 Comparaison avec les résultats de simulation numérique directe de couche de mélange temporelle

Les caractéristiques des résultats obtenus en simulation numérique directe posent en général des difficultés vis à vis de leur comparaison avec les résultats donnés par des codes RANS. En raison de la taille des domaines de calcul utilisés en DNS, ainsi qu'à la structure adimensionnelle des équations résolues par le code NTMIX (code de DNS utilisé dans le CRCT), la transposition entre les deux types d'approches n'est souvent pas aisée. De même, les codes DNS ne sont en général adaptés qu'à la résolution de configurations physiques de grande simplicité. L'intérêt de faire des calculs avec des codes RANS reproduisant les configurations DNS est donc limité. Cependant, la nature simple du cas test 1D utilisé pour l'étude du modèle PDFA/CHI s'adapte bien à ce genre d'exercice. Nous avons vu dans la section 4.2.2 que la configuration de couche de limite temporelle calculée représente un système statistiquement 1D qui évolue dans le temps (comme les tests 1D effectués dans cette section). A défaut de résultats expérimentaux dans des configurations plus réalistes, ce test est donc un bon moyen de contrôler la validité du modèle PDFA/CHI lors de son implantation dans un code RANS.

La première tâche a réaliser est la transformation des paramètres adimensionnels DNS en unités physiques. Une variable X est calculée par le produit entre sa valeur adimensionnelle X^*

et sa valeur de référence X_{ref} ,

$$X = X^* X_{ref}$$

A partir du nombre de Reynolds de la DNS ($Re_{ac} = 10000$ dans le cas étudié),

$$Re_{ac} = \frac{a_{ref}Lref}{\nu_{ref}} = 10000 \tag{5.6}$$

où a_{ref} , Lref et ν_{ref} sont respectivement la vitesse du son, la longueur et la viscosité cinématique de référence, nous pouvons construire un cas réel pour KIVA. Les valeurs de référence des variables caractéristiques des espèces utilisées (densité, capacité calorifique, viscosité...) sont celles de l'air à la température T = 300K. Le tableau 5.4 est alors obtenu.

$Re_{ac} = 10000$	$\gamma = 1.4$	$R_{air} = 287 j/kgK$
$T_{air} = 300K$	$\rho_{ref} = 1.177 kg/m^3$	$\nu_{ref} = 1.568 \times 10^{-5} m^2 / s$
$a_{ref} = 347m/s$	$L_{ref} = 4.52 \times 10^{-4} m$	$t_{ref} = 1.303 \times 10^{-6} s$

Tableau 5.4 : Valeurs de référence des différentes variables de l'écoulement. Toutes les autres variables s'expriment en fonction de ces variables de référence.

Pour le calcul du taux de réaction, une hypothèse de chimie simple a été utilisée. Le taux de réaction instantané est donné par

$$\dot{\omega}_i = A\rho_F \rho_O \exp\left(-T_a/T\right) \tag{5.7}$$

Les unités de la constante pré-exponentielle correspondent au produit entre l'inverse d'un temps et l'inverse d'une densité. La formulation est ainsi cohérente avec celle utilisée en DNS.

Le carburant utilisé est le méthane (CH_4) dont la fraction de mélange stoechiométrique est $Z_{st} = 0.055$. L'oxydant est l'oxygène dont la fraction massique par rapport à l'air est 0.233. La température initiale du carburant est $T_{F,0} = 600K$ et la température initiale de l'oxydant est $T_{O,0} = 1200K$. Les profils des concentrations de carburant et d'oxydant sont initialisés de la manière décrite dans la section 5.2.1 en respectant la taille des profils utilisés en DNS. Par contre, $Z^{"2}$ n'est pas initialisée de la manière choisie dans la section 5.2.2. En effet, en DNS nous n'avons pas le choix de la valeur de $Z^{"2}_{t=t_0}$, car elle est forcément nulle. En choisissant d'initialiser Y_F et Y_O avec la solution de l'équation de transport diffusif de ces espèces en régime laminaire, nous sommes en train d'imposer un mélange total entre les deux espèces $(Z^{"2}_{t=t_0} = 0)$.

Un mot doit être aussi dit concernant les paramètres turbulents. Nous avons vu que la résolution des équations de transport de k et de ϵ n'est pas évidente dans un écoulement 1D. De plus, le comportement de ces grandeurs issues de la solution de leurs équations de transport modélisées n'est pas le même que celui de la turbulence utilisée dans les calculs de couche de mélange temporelle bidimensionnelle. En effet, l'utilisation d'une turbulence 2D en DNS sert nos propos du point de vue de l'interaction flamme champ turbulent, mais ne peut pas être

comparée à une turbulence réelle [68]. Quand les équations de Navier Stokes sont résolues dans leur forme 2D sans modèle de turbulence, la dynamique des structures turbulentes est différente de leur dynamique réelle. Le transfert d'énergie se fait des petites vers les grandes échelles. Ceci n'est pas reproductible avec le modèle $k - \epsilon$. Nous avons donc choisi d'imposer une turbulence homogène dans le domaine, même si ce n'est pas le cas, comme le montre le tableau 5.5.

t^*	ϵ^*	k^*
1.11	1.27×10^{-4}	5.56×10^{-3}
5.56	4.64×10^{-5}	3.35×10^{-3}
9.65	1.49×10^{-4}	8.90×10^{-3}
13.06	4.12×10^{-5}	4.84×10^{-3}
16.56	2.57×10^{-5}	2.00×10^{-3}
19.38	3.57×10^{-5}	2.25×10^{-3}

Tableau 5.5 : Evolution dans le temps des paramètres turbulents k et ϵ pour le calcul DNS 2D d'une couche de mélange temporelle.

Les résultats obtenus, présentés sur la figure 5.11, sont très satisfaisants. Le délai d'autoinflammation calculé est proche du délai obtenu en DNS. L'endroit où, en moyenne la flamme s'allume, est aussi le même dans les deux cas (autour de $\tilde{Z} \approx 0.5$). Le modèle reproduit aussi la flamme de diffusion établie à la fin de l'auto-allumage.

Concernant les différences observées, il est clair que la forme de la zone de réaction n'est pas la même et que la diffusion turbulente n'est pas bien reproduite (phénomène observable à partir de la forme des iso-lignes de fraction de mélange). Ceci peut être expliqué par les approximations effectuées lors de la détermination des paramètres turbulents. Nous avons vérifié que le calcul était sensible au niveau de turbulence choisi. Les différences dans la forme de la zone d'autoallumage ne peuvent pas être analysées de manière simple. Comme nous l'avons vu lors de la présentation de cette expérience numérique (section 4.2.2), les statistiques effectuées manquent de données. D'autres calculs devraient être réalisés en imposant une génération aléatoire de turbulence différente et en gardant la même physique.



Figure 5.11 : Comparaison entre le taux de réaction moyen calculé en DNS dans le cas de la couche de mélange temporelle et celui calculé par KIVA II MB avec le modèle PDFA/CHI. Les lignes continues représentent les valeurs moyennes de la fraction de mélange au cours du temps dans le domaine 1D.

5.3 Conclusion

Une version simplifiée du modèle PDFA d'auto-allumage à *pdf* présumées, couplé à un modèle de flammelettes en chimie infiniment rapide, a été implantée dans le code de calcul KIVA II MB. Les résultats obtenus lors de l'étude du modèle dans une configuration unidimensionnelle sont très satisfaisants. Le modèle contient des effets chimiques couplés à des effets turbulents qui lui permettent de reproduire l'auto-inflammation dans une gamme de situations assez variée.

L'adaptation effective au code KIVA et plus spécialement aux calculs moteur, demande quelques modifications du fait qu'il s'agit d'écoulements à pression et à volume variables et où les conditions initiales sont loin d'être homogènes et bien définies (présence de gaz non brûlés, présence de gaz résiduels ou échanges thermiques avec les parois). Il faut donc que les conditions limites $(Y_{i,0}, T_{i,0})$, nécessaires dans des différentes étapes de calcul, soient effectivement définies à chaque pas de temps de calcul.