2.4 Modélisation à l'aide de flammelettes laminaires

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

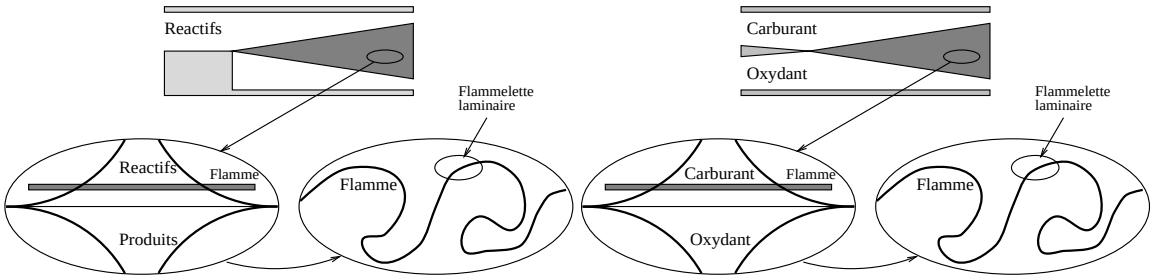

Figure 2.8 : Description de la combustion turbulente prémélangée et non prémélangée à l'aide d'une structure de flammelettes.

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

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

2.4.1 Flammelettes en combustion prémélangée

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

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

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

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

Le diagramme de combustion prémélangée de Peters et de Borghi

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

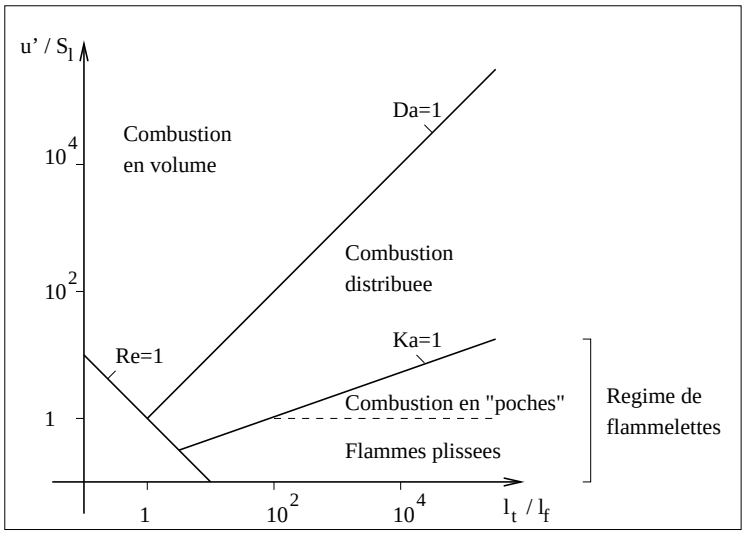

Figure 2.9 : Diagramme de combustion prémélangée. D'après Peters et Borghi.

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

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

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

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

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

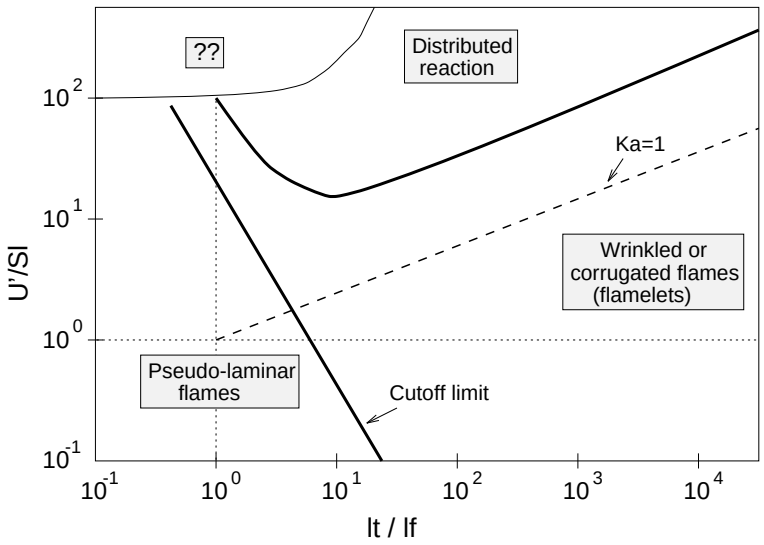

Figure 2.10 : Diagramme de combustion turbulente prémélangée, basé sur des résultats de DNS. D'après Poinsot *et al.*

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

Bibliothèques de flammelettes en combustion prémélangée

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

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

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

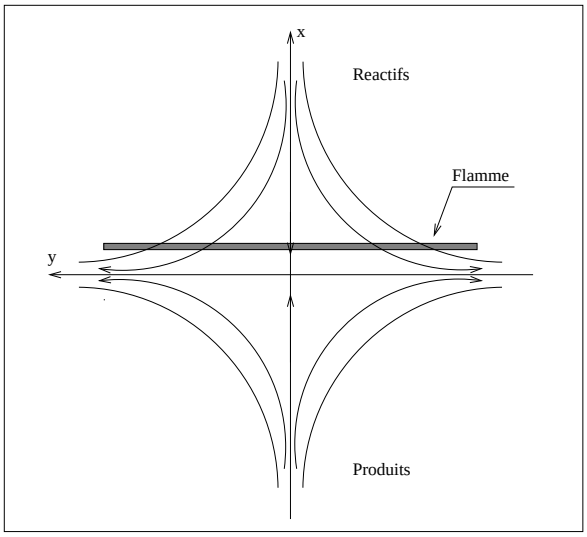

Figure 2.11 : Flamme laminaire de prémélange étirée avec écoulement des réactifs et des produits à contre-courant.

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

2.4.2 Modèles de flammelettes en combustion prémélangée

Le modèle EBU "*Eddy-Breakup*"

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

$$Re = \frac{U\,L}{\nu} \tag{2.37}$$

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

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

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

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

$$\overline{\dot{\omega}} = -\overline{\rho}\, C_{EBU} \frac{\sqrt{\widetilde{c''^2}}}{\tau_{EBU}} \tag{2.38}$$

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

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

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

$$\tau_{EBU} = \frac{k}{\epsilon} \tag{2.40}$$

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

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

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

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

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

Le modèle BML "*Bray-Moss-Libby*"

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

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

$$\overline{\dot{\omega}} = \omega_L\,\Sigma \tag{2.42}$$

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

La densité de surface de flamme est calculée par,

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

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

$$L_y = \frac{S_l}{\Lambda} = \frac{S_l}{\frac{\epsilon}{k}} \tag{2.44}$$

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

Modèle de flamme cohérente: Equation de transport de Σ

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

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

$$\frac{\partial \Sigma}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\tilde{u}_k \Sigma\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(< u_k'' >_s \Sigma\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(< w\, n >_s \Sigma\right) = < A_t >_s \Sigma + < a_t >_s \Sigma + 2 < w\, H >_s \Sigma \tag{2.45}$$

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

$$< A_t >_s = \left(\delta_{ij} - < n_i n_j >_s\right) \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \tag{2.46}$$

$$< a_t >_s = \left\langle \delta_{ij} \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} - n_i n_j \frac{\partial u_i''}{\partial x_j} \right\rangle_s \tag{2.47}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker.

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

$$\Lambda = \frac{1}{A}\frac{dA}{dt} \tag{2.48}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

$$\omega_L = \rho_u S_l \tag{2.51}$$

où ρ_u est la densité des gaz frais.

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

$$\bar{\dot{\omega}} = \omega_L \, \Sigma \tag{2.52}$$

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

2.4.3 Flammelettes et combustion non prémélangée

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

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

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

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

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

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

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

Régimes de combustion non prémélangée selon Peters

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

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

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

Régimes de combustion non prémélangée selon Bilger

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

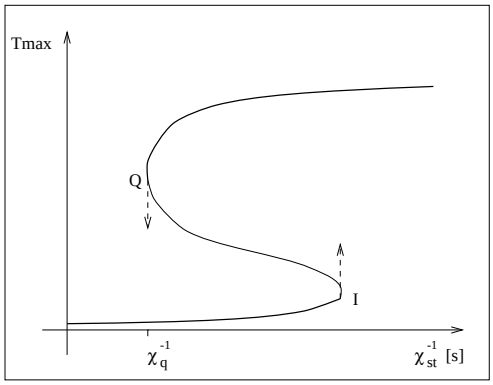

Figure 2.12 : Température maximale de la réaction en fonction de la dissipation scalaire dans les endroits à $f = f_{st}$ pour une flamme de diffusion. Le point Q correspond à l'extinction de la flamme et le point I à un allumage spontané. D'après Peters.

Bibliothèques de flammelettes en combustion non prémélangée

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

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

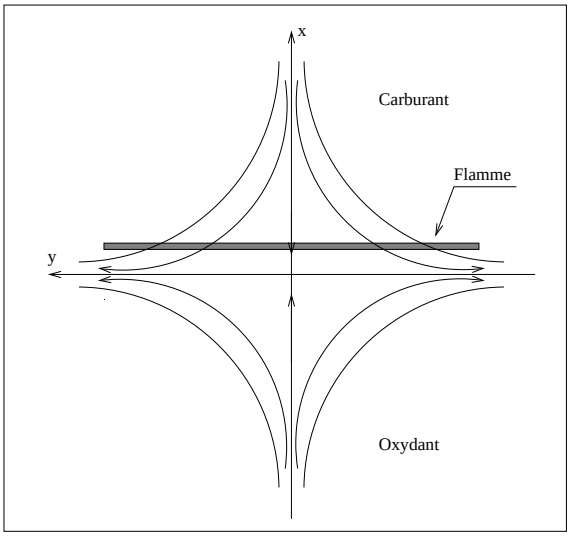

Figure 2.13 : Flamme laminaire étirée avec l'écoulement des réactifs à contre courant.

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

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

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

$$T = F\left(Z, \chi_f\right)$$
$$Y_j = F_j\left(Z, \chi_f\right)$$

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

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

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

Modèle à chimie infiniment rapide

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

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

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

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

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

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

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

$$\dot{\omega}_j = -\rho D \left|\nabla Z\right|^2 \frac{d^2 Y_j}{dZ^2} \tag{2.55}$$

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

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

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

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

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

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

$$P\left(\chi, Z_{st}\right) = P\left(\chi \left| Z_{st}\right.\right) . P\left(Z_{st}\right) \tag{2.58}$$

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

L'équation 2.56 s'écrit alors,

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

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

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

Modèle RIF: "Representative Interactive Flamelet"

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

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

$$\dot{\omega}_j = \rho\frac{\partial Y_j}{\partial t} - \rho D\left|\nabla Z\right|^2\frac{d^2Y_j}{dZ^2} \tag{2.61}$$

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

Modèle de flamme cohérente et flammes de diffusion

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

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

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

$$\overline{\dot{\omega}}_j = \overline{\rho} V_{d_j} \Sigma \tag{2.62}$$

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

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

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

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

2.4.4 Modélisation de la combustion dans un moteur Diesel

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

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

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

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

Modèle "*Eddy-Breakup*" de Magnussen et Hjertager

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

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

$$\bar{\dot{\omega}}_F = A\,\tilde{Y}_F \frac{\epsilon}{k} \tag{2.64}$$

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

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

$$\bar{\dot{\omega}}_F = A \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{r} \frac{\epsilon}{k} \tag{2.65}$$

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

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

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

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

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

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

Modèle du temps caractéristique de Reitz

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

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

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

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

$$\tau_c = \tau_l + f\,\tau_t \tag{2.69}$$

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

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

$$f = \frac{1 - e^{-r}}{0.632} \tag{2.70}$$

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

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

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

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

Modèle de Musculus et Rutland

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

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

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

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

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

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

$$Da = \frac{A\, e^{-E_a/RT}}{\epsilon/k} \tag{2.72}$$

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

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

2.5 Modèle à trois équations de transport de surface

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

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

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

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

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

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

2.5.1 Conception du modèle

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

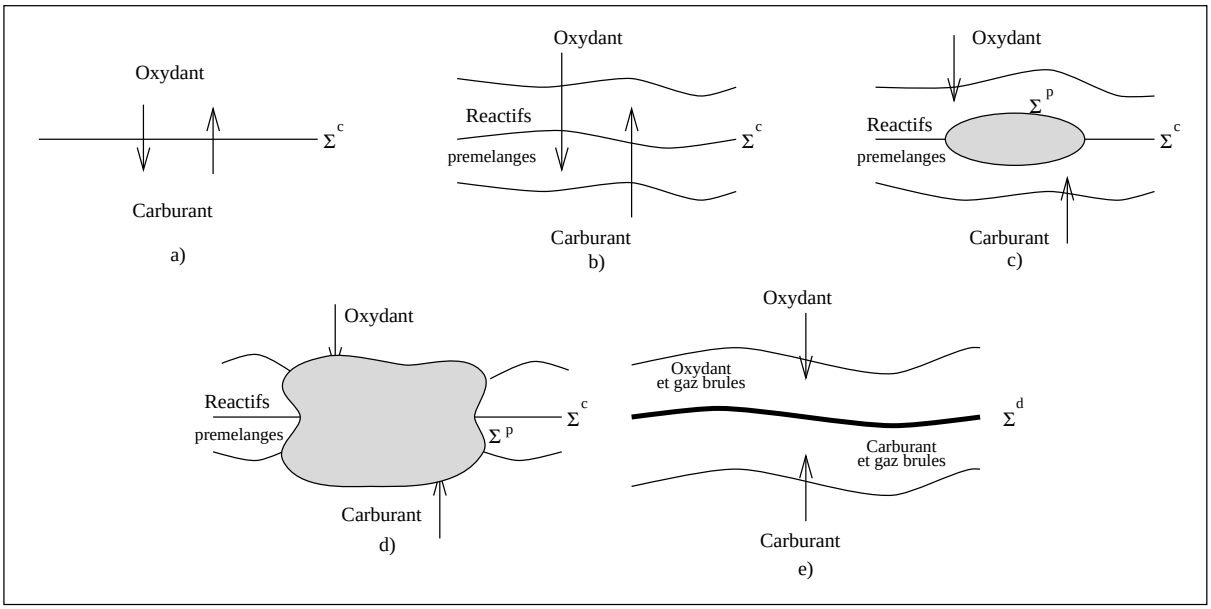

Figure 2.14 : Représentation schématique des processus physiques présents dans le modèle à trois surfaces; a) surface de mélange séparant carburant et oxydant; b) formation d'une zone de gaz prémélangé; c) allumage et propagation d'une flamme de prémélange; d) établissement de la flamme de diffusion;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

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

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

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

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

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

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

La quantité totale de carburant est donc,

$$\tilde{Y}_F = \tilde{Y}_{p_F} + \tilde{Y}_{d_F} \tag{2.75}$$

et d'oxydant,

$$\tilde{Y}_O = \tilde{Y}_{p_O} + \tilde{Y}_{d_O} \tag{2.76}$$

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

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

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

et pour les espèces prémélangées,

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

2.5.2 Equations de transport des densités de surface

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

- Densité de surface de flamme de diffusion,

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

- Densité de surface de flamme de prémélange,

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

- Densité de surface de contact,

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

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

2.5.3 Modélisation des termes source des équations de transport de Σ

Surface de flamme de diffusion

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

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

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

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

Surface de flamme de prémélange

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

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

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

Surface de contact

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

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

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

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

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

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

$$R_d = -R_c = \gamma \frac{S_l}{\tilde{X}_u} \Sigma_p^2 \tag{2.82}$$

où γ est une constante du modèle.

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

2.5.4 Validité du modèle 3CFM

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

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

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

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

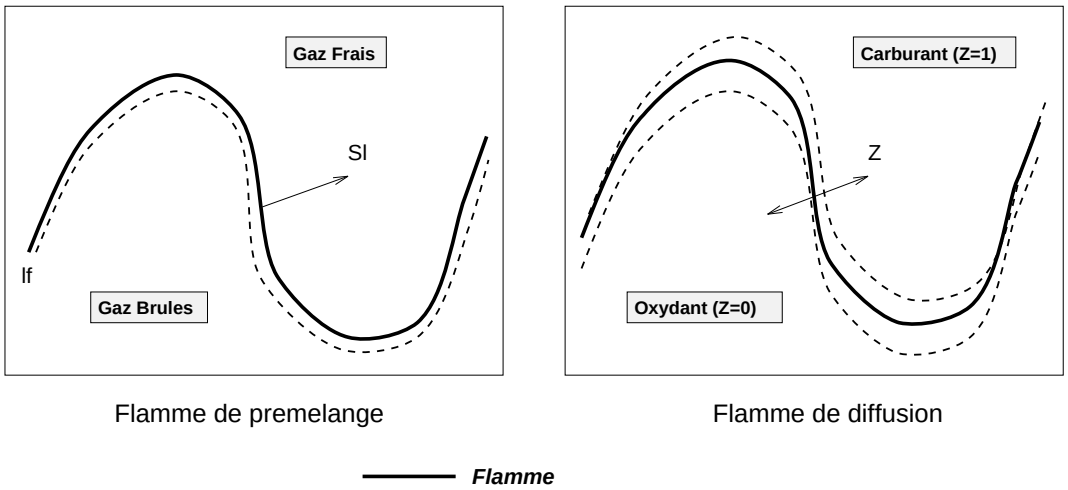

Figure 2.15 : Surface de flamme de prémélange et surface de flamme de diffusion. La surface de flamme de prémélange se propage par rapport à l'écoulement avec une vitesse S_l perpendiculaire au front de flamme. L'épaisseur du front de flamme l_f est petite par rapport aux échelles turbulentes. La flamme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

Le mélange

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

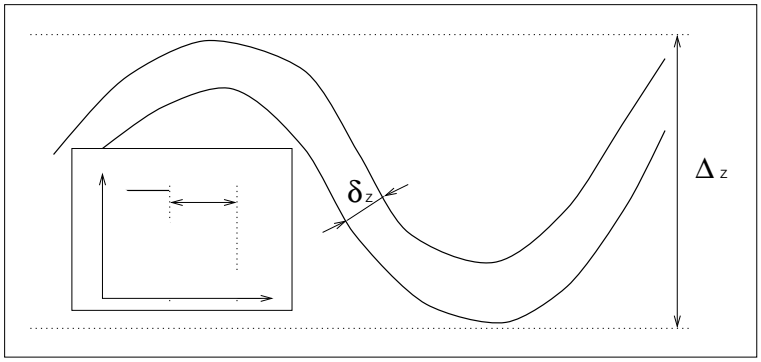

Figure 2.16 : Représentation schématique de la structure interne de la zone de mélange et de son profil moyen. La variable x est une coordonnée spatiale caractéristique du système.

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

$$\delta_Z \approx \left|\overline{\nabla Z}\right|^{-1} = \sqrt{\frac{2D}{\bar{\chi}}} \tag{2.83}$$

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

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

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

$$\frac{\delta_Z}{\Delta_Z} \approx Re_t^{-\frac{1}{2}} \tag{2.85}$$

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

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

$$\bar{\dot{\omega}}_{p_i} = V_{c_i} \Sigma_c \tag{2.86}$$

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

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

La flamme de diffusion

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

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

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

$$\bar{\omega}_i = V_{d_i} \Sigma_d \tag{2.87}$$

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

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

La flamme de prémélange

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

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

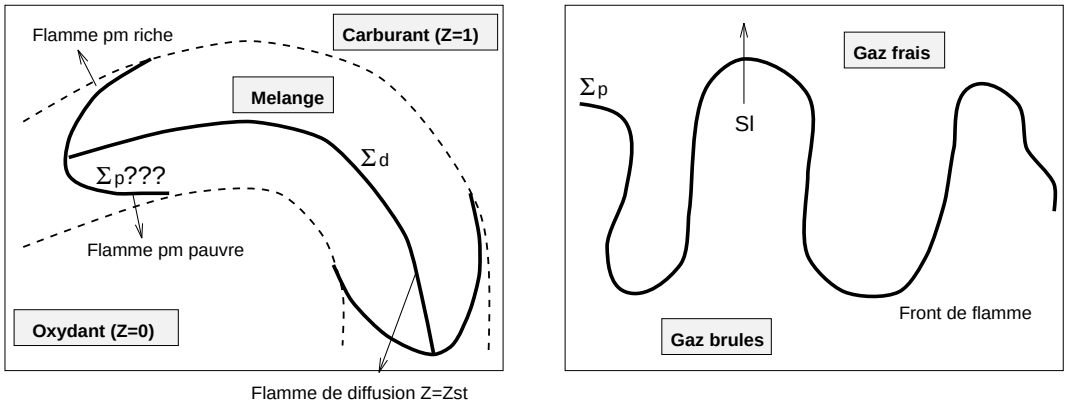

Figure 2.17 : Flamme de prémélange se propageant à l'intérieur d'une zone de mélange après l'auto-inflammation et flamme de prémélange se propageant dans un milieu turbulent à richesse constante. L'influence de la turbulence ne se fait probablement pas sentir pendant la propagation de la flamme à l'intérieur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

2.5.5 Conclusion

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

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

2.6 Conclusion

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

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

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

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

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