

Chapitre 3

Modélisation du taux de réaction

3.1 Introduction

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

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

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

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

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

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

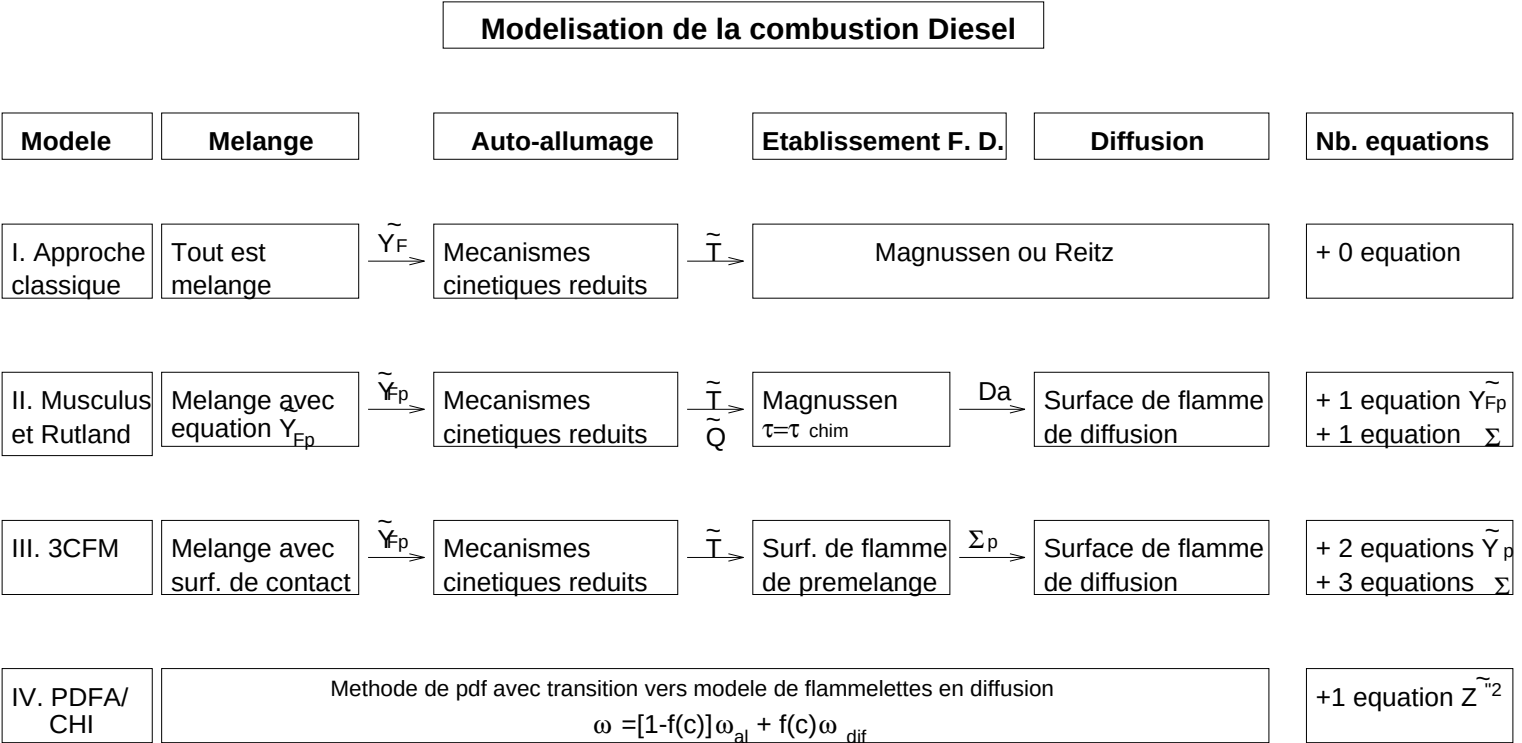


Figure 3.1 : Les trois approches différentes à la modélisation de la combustion dans les moteurs Diesel présentées dans le chapitre 2, ainsi que la formulation du modèle PDF/A/CHI proposé dans ce chapitre.

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

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

3.2 Mélange turbulent non réactif

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

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

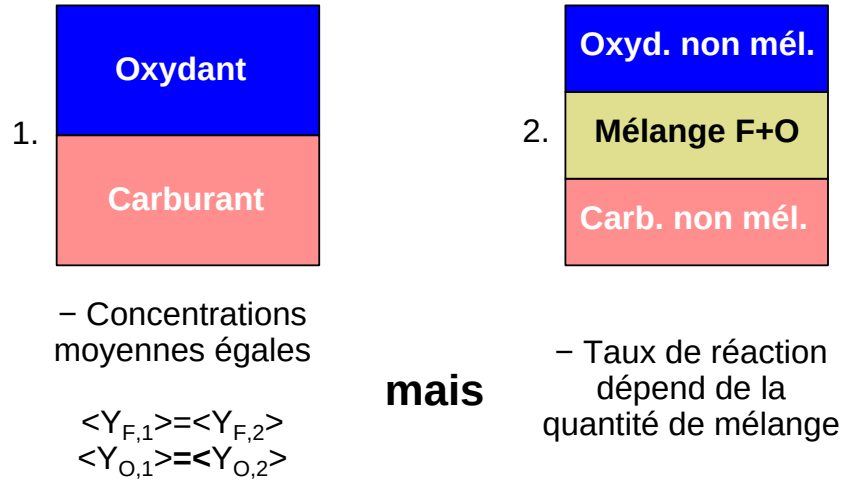


Figure 3.2 : Distribution des réactifs dans une maille de calcul. La concentration moyenne ne suffit pas à la description de la structure et de la quantité de mélange.

3.2.1 Grandeurs étudiées et procédure

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.2.2 Modèles pour le calcul de la fraction des espèces prémélangées

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.2.3 Détermination des *pdf* de mélange

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

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

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

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

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

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

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

3.2.4 Conclusion

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

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

3.3 Mélange turbulent avec combustion: Modélisation

3.3.1 Introduction

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

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

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

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

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

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

3.3.2 Formulation du modèle PDFFA

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Détermination de la variable d'avancement c

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

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

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

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

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

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

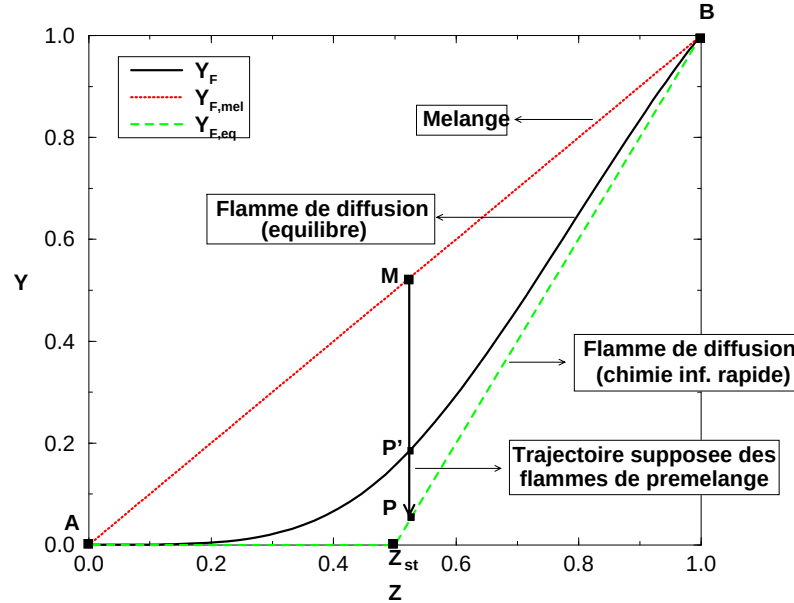


Figure 3.3 : Variation de la concentration massique de l'espèce F en fonction de la fraction de mélange Z ; évolution effective (Y_F), mélange pur sans combustion ($Y_{F,mel} \Rightarrow c = 0$) et équilibre chimique avec chimie infiniment rapide ($Y_{F,eq} \Rightarrow c = 1$). Condition limite: $Y_{F,0}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

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

Une variable d'avancement peut alors être écrite:²

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

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

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

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

Détermination de la pdf de c

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

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

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

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

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

Modèle PDFa: Le taux de réaction moyen

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.3.3 Chimie non infiniment rapide

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

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

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

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

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

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

et ξ est le paramètre de l'analyse asymptotique,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

soumise aux conditions limites,

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

3.3.5 Le couplage PDFA/CHI

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

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

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

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

3.4 Conclusion

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

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

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

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

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