

Simulation d'écoulements réactifs

Codes AVBP et Flow1D

Ce chapitre présente les modèles utilisés pour la simulation d'écoulements gazeux réactifs et les équations qui en découlent. Les deux codes utilisés au cours de cette thèse y sont présentés : AVBP et Flow1D. Le code AVBP est utilisé pour la simulation aux grandes échelles (LES) tridimensionnelle. Le code Flow1D permet de simuler des écoulements monodimensionnels et a été développé pendant cette thèse afin de tester et utiliser les méthodes de couplage avec AVBP. Les équations de Navier-Stokes sont d'abord présentées sous leur forme générale. Les différents modèles et hypothèses concernant la thermodynamique et la diffusion sont introduits pour les codes AVBP et Flow1D. Le principe de la LES est ensuite présenté. Enfin les méthodes numériques associées aux deux codes ainsi que les modèles particuliers à la combustion turbulente et à la modélisation monodimensionnelle de systèmes moteurs sont décrits.

2.1 Équations de la mécanique des fluides

Les équations de conservation, dites de Navier-Stokes, s'écrivent pour un mélange réactif :

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [p \delta_{ij} - \tau_{ij}] \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho E u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [u_i (p \delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_j] + \dot{w}_T + Q_r \quad (2.2)$$

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [J_{j,k}] + \dot{w}_k \quad (2.3)$$

Où ρ , u , E , p et ρ_k sont respectivement, la masse volumique du mélange, le vecteur vitesse, l'énergie totale par unité de masse, la pression et la masse volumique spécifique de chaque espèce k . Cette dernière s'exprime en fonction des fractions massiques Y_k : $\rho_k = \rho Y_k \forall k \in [1, N]$. Les réactions chimiques interviennent par le biais des termes sources \dot{w}_k qui sont les taux de production ou de consommation de l'espèce k et \dot{w}_T qui est le taux de production ou d'absorption de chaleur. Q_r caractérise les transferts thermiques par rayonnement. q et J_k sont respectivement les flux diffusifs de chaleur et de l'espèce k . τ est le tenseur des contraintes visqueuses.

Les équations de Navier-Stokes ainsi écrites sont dites sous forme conservative. On les écrit souvent sous forme vectorielle

$$\frac{\partial}{\partial t} W + \nabla \cdot F + C = 0 \quad (2.4)$$

où W est le vecteur des variables conservatives, F tenseur des flux et C le vecteur des termes sources.

$$W = (\rho u_i, \rho E, \rho_k)^T \quad (2.5)$$

On décompose classiquement le tenseur de flux en composantes convective F_I et visqueuse F_V :

$$F_I = \begin{pmatrix} \rho u_i u_j + p \delta_{ij} \\ (\rho E + p \delta_{ij}) u_j \\ \rho_k u_j \end{pmatrix} \quad (2.6)$$

$$F_V = \begin{pmatrix} -\tau_{ij} \\ -(u_i \tau_{ij}) + q_j \\ J_{j,k} \end{pmatrix} \quad (2.7)$$

Pour un fluide Newtonien isotrope on écrit le tenseur des contraintes visqueuses τ

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right) \quad (2.8)$$

avec S le tenseur des déformations défini par

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (2.9)$$

2.1.1 Variables thermodynamiques

Les enthalpies sensibles massiques ($h_{s,k}$) et entropies massiques (s_k) sont calculées à partir des données JANAF [24]. Ces données fournissent les enthalpies sensibles molaires ($h_{s,k}^m$) et les entropies molaires (s_k^m) pour un grand nombre d'espèces chimiques entre 200 K et 6000 K et sont généralement utilisées de deux manières, sous forme de tables ou de polynômes.

Le code AVBP utilise une table dont la taille permet d'obtenir un très bon temps de retour. L'état de référence standard utilisé est $p_0 = 1$ bar et $T_0 = 0$ K et les enthalpies sensibles massiques ($h_{s,k}$) et entropies massiques (s_k) sont tabulées pour 51 valeurs de température

$(T_i, i \in [1, 51])$ entre 0 K et 5000 K.

$$\begin{aligned} h_{s,k}(T_i) &= \int_{T_0}^{T_i} C_{p,k} dT \\ &= \frac{h_{s,k}^m(T_i) - h_{s,k}^m(T_0)}{M_k} \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$s_k(T_i) = \frac{s_k^m(T_i) - s_k^m(T_0)}{M_k} \quad (2.11)$$

L'énergie sensible de chaque espèce ($e_{s,k}$) est calculée pour les valeurs de température tabulées à partir de

$$\begin{aligned} e_{s,k}(T_i) &= \int_{T_0}^{T_i} C_{v,k} dT \\ &= h_{s,k}(T_i) - r_k T_i \end{aligned} \quad (2.12)$$

Les capacités calorifiques massiques à pression constante $C_{p,k}$ et à volume constant $C_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_i et T_{i+1}

$$C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \quad (2.13)$$

$$C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \quad (2.14)$$

L'énergie sensible pour toute température $T \in [T_i, T_{i+1}]$ est obtenue par interpolation linéaire

$$e_{s,k}(T) = e_{s,k}(T_i) + (T - T_i) \frac{e_{s,k}(T_{i+1}) - e_{s,k}(T_i)}{T_{i+1} - T_i} \quad (2.15)$$

Enfin l'énergie et l'enthalpie sensible du mélange s'écrivent

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} \quad (2.16)$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^N \rho_k h_{s,k} \quad (2.17)$$

Dans le code Flow1D c'est l'utilisation de polynômes qui a été préférée avec l'état de référence $p_0 = 1$ bar $T_0 = 298$ K. D'un point de vue numérique la valeur du polynôme en un point est calculée par la méthode de Horner et les zéros du polynôme par la méthode de Newton-Raphson. On a alors directement

$$h_{s,k}(T) \in P^6 \quad e_{s,k}(T) \in P^6 \quad C_{p,k}(T) \in P^5 \quad C_{v,k}(T) \in P^5 \quad (2.18)$$

où P^n est l'ensemble des polynômes d'ordre n .

2.1.2 Équation d'état

L'équation d'état d'un mélange de gaz parfaits s'écrit :

$$p = \rho \frac{R}{M} T \quad (2.19)$$

où R est la constante des gaz parfaits et M la masse molaire du mélange :

$$\frac{1}{M} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{M_k} \quad (2.20)$$

Les chaleurs spécifiques C_p et C_v ainsi que la constante du mélange r dépendent des fractions massiques :

$$C_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (2.21)$$

$$C_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (2.22)$$

$$r = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (2.23)$$

L'exposant polytropique du mélange est calculé à partir des chaleurs spécifiques $\gamma = C_p/C_v$. Ainsi les propriétés du gaz dépendent du temps et de la position dans l'espace :

$$r(\vec{x}, t) \quad C_p(\vec{x}, t) \quad C_v(\vec{x}, t) \quad \gamma(\vec{x}, t) \quad (2.24)$$

La température est obtenue en inversant numériquement l'équation de l'énergie totale (2.15 ou 2.18) et la vitesse du son dans le mélange s'écrit

$$a = \sqrt{\gamma r T} \quad (2.25)$$

2.1.3 Diffusion moléculaire multi-espèce

Dans un écoulement diffusif multi-espèces, la conservation de la masse totale de gaz se traduit par l'égalité 2.26

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0 \quad (2.26)$$

où V^k est la vitesse de diffusion de l'espèce k qui est exprimée, en utilisant l'approximation de Hirschfelder Curtis, à partir des fractions molaires X_k des espèces

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.27)$$

Cette approximation ne garantit pas le respect de l'équation 2.26, on ajoute alors une vitesse de diffusion corrective V^c pour assurer la conservation de la masse [25].

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.28)$$

On écrit alors la vitesse de diffusion de l'espèce k comme la somme de la vitesse de Hirschfelder Curtis et de la vitesse corrective

$$J_{i,k} = \rho Y_k (V_i^k + V_i^c) \quad (2.29)$$

$$= -\rho \left(D_k \frac{M_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k \sum_{l=1}^N D_l \frac{M_l}{M} \frac{\partial X_l}{\partial x_i} \right) \quad (2.30)$$

où D_k est la diffusivité de l'espèce k dans le mélange caractérisée au §2.1.5.

2.1.4 Diffusion de la chaleur

Dans le cas multi-espèces viennent s'ajouter au flux de chaleur par conduction q^{cond} des flux de chaleur liés à la diffusion des espèces $q_i^{\text{diff},k}$. Le flux de chaleur total q s'écrit

$$\begin{aligned} q_i &= q_i^{\text{cond}} + \sum_{k=1}^N q_i^{\text{diff},k} \\ &= -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_i^k h_{s,k} \end{aligned} \quad (2.31)$$

où λ est la conductivité thermique du mélange présentée au §2.1.5.

2.1.5 Coefficients de transport

La viscosité dynamique du mélange μ est supposée indépendante de sa composition. Les variations de la viscosité en fonction de la température sont prises en compte grâce à une loi de puissance

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^b \quad (2.32)$$

où μ_0 est la viscosité mesurée à la température T_0 et b est compris entre 0.5 et 1 (0.76 pour l'air).

La même hypothèse est appliquée à la conductivité thermique du mélange qui s'exprime en fonction du nombre de Prandtl du mélange Pr .

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{\text{Pr}} \quad (2.33)$$

Le nombre de Prandtl qui représente le rapport entre la diffusivité de quantité de mouvement μ et la diffusivité thermique λ est supposé constant. Ainsi la diffusivité thermique est calculée à partir de la viscosité dynamique.

Cette hypothèse n'est plus valide pour le calcul des coefficients de diffusion des espèces D_k . Ces coefficients peuvent être exprimés comme une fonction [26] de coefficients binaires D_{lm} obtenus par la théorie de la cinétique des gaz [27]

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{l \neq k}^N X_l / D_{lk}} \quad (2.34)$$

Les D_{lm} sont des fonctions complexes des collisions intermoléculaires et des variables thermodynamiques. Cette approche est adaptée à des simulations DNS avec une chimie détaillée. Dans le cas de schémas cinétiques simplifiés ce niveau de précision est superflu. Ainsi AVBP utilise une version simplifiée qui utilise les nombres de Schmidt Sc_k des espèces en les supposant constants

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (2.35)$$

2.1.6 Simulation aux grandes échelles (LES)

Le principe de la LES consiste à séparer les grandes et les petites échelles par l'application d'un filtre spatial passe-bas. En faisant le produit de convolution d'une grandeur Φ avec le filtre G_Δ , on obtient la composante correspondant aux grandes échelles $\bar{\Phi}$:

$$\bar{\Phi}(\vec{x}) = \int_{\Omega} G_\Delta(\vec{x} - \vec{\xi}) \Phi(\vec{\xi}) d\vec{\xi} \quad (2.36)$$

où Ω est le domaine de calcul et Δ la taille du filtre.

Une fois la grandeur Φ filtrée on peut la décomposer en sa partie dite résolue ou filtrée $\bar{\Phi}$ et la partie correspondant aux petites échelles Φ' dite de sous-maille.

$$\Phi' \equiv \Phi - \bar{\Phi} \quad (2.37)$$

Cela s'apparente à la décomposition de Reynolds qui est utilisée pour les écoulements incompressibles. On écrit pour les systèmes compressibles le filtrage de Favre :

$$\tilde{\Phi} \equiv \frac{\overline{\rho \Phi}}{\bar{\rho}} \quad (2.38)$$

Les fluctuations associées Q'' s'écrivent

$$\Phi'' \equiv \Phi - \tilde{\Phi} \quad (2.39)$$

Les fonctions filtre possèdent trois propriétés importantes : la décomposition est linéaire, l'opération de filtrage commute avec les opérateurs de dérivation et le filtre est normalisé ($\bar{1} = 1$). Dans le code AVBP, l'échelle de coupure est fixée par la taille de maille, on dit que le filtrage est implicite. Cela implique que lorsque la taille du maillage varie, les opérateurs de dérivation spatiale et de filtrage ne commutent plus. Cependant cette erreur de commutation est en général négligeable [28]. Dans le cadre de la simulation de moteur à piston, le mouvement de maillage engendre des erreurs de commutation temporelle qui sont elles aussi négligeables [29].

Les équations de Navier Stokes 2.4 filtrées s'écrivent après simplification

$$\frac{\partial \bar{\rho}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho}_k \tilde{u}_j + \overline{J_{j,k}}] = -\frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{J_{j,k}^t}] \quad (2.40)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j + \bar{p} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij}] = \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{\tau_{ij}^t}] \quad (2.41)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} [\bar{\rho} \tilde{E}] + \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E} + \bar{u}_j \bar{p} + \bar{q}_j] = -\frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{q_j^t}] \quad (2.42)$$

L'opération de filtrage fait apparaître des termes qui caractérisent les effets des petites échelles. Il est nécessaire de fermer ces termes dits de sous-maille, c'est à dire de les exprimer en fonction de variables connues.

On ne présente ici que la fermeture de l'équation de quantité de mouvement. Le tenseur de Reynolds est défini par

$$\bar{\tau}_{ij}^t = -\bar{\rho}(\overline{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (2.43)$$

Il est modélisé en utilisant une viscosité turbulente ν_t qui suppose que l'effet des échelles de sous-maille est purement dissipatif

$$\bar{\tau}_{ij}^t = 2\bar{\rho}\nu_t(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll}) \quad (2.44)$$

avec

$$\widetilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \quad (2.45)$$

Dans la suite des travaux, seul le modèle de Smagorinsky est utilisé :

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2\widetilde{S}_{ij}\widetilde{S}_{ij}} \quad (2.46)$$

où la constante du modèle $C_S = 0.18$. C'est un modèle qui a été testé sur de très nombreuses configurations et qui a la particularité de donner la bonne dissipation pour les cas de turbulence homogène isotrope. Il est néanmoins connu pour être trop dissipatif [30, 31].

2.2 Description numérique du code AVBP

2.2.1 Discrétisation, méthode Cell-Vertex

Le code AVBP a été développé de manière à utiliser des maillages non-structurés (la composition des éléments et les positions de ses nœuds ne peuvent pas être déduites d'une règle de construction) et hybrides (composés de différents types d'éléments). Ce type de maillage permet une grande flexibilité pour la discrétisation de géométries complexes et de choisir le type d'élément le plus adapté au mouvement de maillage. La thèse de Enaux [32] montre que les tétraèdres sont les éléments les plus adaptés à la simulation d'écoulement moteur avec le code AVBP. On commence par discrétiser le domaine fluide Ω en éléments C appelés cellules ou mailles.

$$\Omega = \bigcup_{C \in T_h} C$$

T_h étant la triangulation du domaine Ω . Les méthodes numériques implantées dans AVBP sont des méthodes volumes finis de type Cell-Vertex. Cette orientation a démontré une meilleure robustesse aux déformations de maillage que les méthodes Cell-Centered ou Vertex-Centered dans les travaux de Rudgyard [33] et Morton et al. [34]. Les méthodes centrées (Centered) consistent à stocker les variables aux centres des volumes de contrôle : en Cell-Centered le volume de contrôle est cellule primaire et les variables sont stockées aux centres des mailles ; en Vertex-Centered le volume de contrôle est la cellule duale et les variables sont stockées aux nœuds du maillage. Dans le cas Cell-Vertex les variables sont stockées aux nœuds du maillage alors que le volume de contrôle est la maille primaire. Cette technique nécessite donc de répartir l'information des nœuds vers les centres de maille et réciproquement.

Le schéma d'un maillage 2D est présenté sur la figure 2.1. On utilise l'indice j pour désigner un nœud du maillage, C une maille primaire et C_j la maille duale associée au nœud j . On appelle D_j l'ensemble des cellules primales qui contiennent le nœud j .

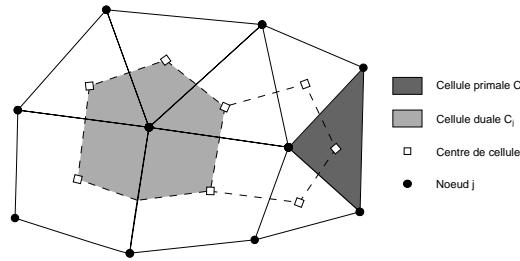


FIGURE 2.1 – Schéma d'un maillage hybride en deux dimensions.

En intégrant l'équation 2.4 sur un volume de contrôle C de normale sortante \vec{n} , en négligeant les termes sources et en y appliquant le théorème de Green-Gauss on peut écrire :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_C W dv + \int_{\partial C} F \cdot \vec{n} ds = 0 \quad (2.47)$$

La première étape de la méthode Cell-Vertex consiste à calculer le résidu aux cellules qui correspond à la divergence du flux de l'équation 2.4 :

$$r_C = \frac{1}{|C|} \int_{\partial C} F_h \cdot \vec{n} ds \quad (2.48)$$

où $|C|$ est le volume de la maille C et F_h l'approximation numérique du flux F . Comme les variables sont stockées aux nœuds, pour calculer ce résidu il est nécessaire de définir l'approximation numérique du flux F_h et les normales aux nœuds. La normale $n_{j,C}$ au nœud j associée à la cellule C est une combinaison linéaire des normales aux faces adjacentes à j dans C , elle s'écrit :

$$n_{j,C} = \sum_{\{f \in C / j \in f\}} -\frac{d}{n_f} \vec{n}_f \quad (2.49)$$

où d est le nombre de dimensions, n_f la normale à la face f pondérée par son aire et n_v^f le nombre de nœuds que possède la face f . Cette définition permet, en utilisant la méthode des

trapèzes pour intégrer le flux, d'écrire les résidus aux cellules r_C :

$$r_C = \frac{1}{|C|} \sum_{k \in C} F_k \cdot \vec{n}_{k,C} \quad (2.50)$$

On doit ensuite exprimer le résidu aux nœuds r_j en fonction des résidus aux mailles adjacentes. De manière générale on écrit :

$$r_j = \frac{1}{|C_j|} \sum_{C \in D_j} \mathbb{D}_{j,C} r_C^n |C| \quad (2.51)$$

On a alors le schéma semi discrétisé :

$$\frac{\partial W_j}{\partial t} = -r_j \quad (2.52)$$

Ce sont les choix de la matrice de répartition \mathbb{D} et la discrétisation de la dérivée temporelle $\frac{\partial W_j}{\partial t}$ qui déterminent le schéma numérique et ses caractéristiques. Le schéma numérique utilisé pour ces travaux est présenté à la section 2.2.2.

2.2.2 Schéma Lax-Wendroff

Le schéma Lax-Wendroff [35, 36] combine une discrétisation spatiale et temporelle pour donner un schéma volume fini centré d'ordre 2 en temps et en espace. Comme tous les schémas centrés d'ordre 2, il produit des oscillations parasites dans les zones de fort gradient. Les méthodes de stabilisation utilisées sont décrites au chapitre 2.2.3. Il s'écrit dans la formulation Cell-Vertex

$$W_j^{n+1} = W_j^n - \frac{\Delta t}{|C_j|} \sum_{C \in D_j} \mathbb{D}_{j,C}^{LW} r_C^n |C| \quad (2.53)$$

avec

$$\mathbb{D}_{j,C}^{LW} = \frac{1}{n_C^v} \mathbb{I} - \frac{\Delta t}{2d|C|} A_C^n \cdot n_{j,C} \quad (2.54)$$

où A_C^n est la matrice Jacobienne du vecteur flux au centre de la maille C .

2.2.3 Stabilisation : Viscosité artificielle

Les schémas numériques pour la convection centrés d'ordre 2 en espace génèrent des oscillations dans les zones présentant de forts gradients. Ces oscillations n'ont aucun sens physique et posent des problèmes de stabilité aux schémas numériques, il est donc nécessaire de les éliminer. Dans AVBP ce sont des viscosités artificielles appliquées dans les zones de forts gradients qui permettent de stabiliser les schémas. Une itération du schéma numérique s'écrit :

$$W_j^{n+1} = W_j^n - \Delta t \left(r_j + d_j^{(2)} + d_j^{(4)} \right) \quad (2.55)$$

où $d_j^{(2)}$ et $d_j^{(4)}$ sont les résidus associés aux viscosités artificielles d'ordre 2 et 4. La viscosité artificielle d'ordre 2 est un pseudo-Laplacien, décrit par Crumpton [37], modulé par le coefficient $\epsilon^{(2)}$ qui est entré par l'utilisateur et le senseur ζ_C qui est non nul dans les zones de forts gradients.

$$d_j^{(2)} = -\frac{1}{|C_j|} \sum_{C \in D_j} \frac{\epsilon^{(2)} \zeta_C |C|}{n_v^C \Delta t} (W_j - W_C) \quad (2.56)$$

La viscosité artificielle d'ordre 4 est proche d'un bi-Laplacien et est utilisée pour détruire les oscillations nœud-à-nœud qui ne sont pas amorties par l'opérateur Cell-Vertex.

$$d_j^{(4)} = -\frac{1}{|C_j|} \sum_{C \in D_j} \frac{\epsilon_C^{(4*)} |C|}{n_v^C \Delta t} \left[\left(\frac{1}{n_v^C} \sum_{k \in C} \nabla W_k \right) (X_c - X_j) - (W_C - W_j) \right] \quad (2.57)$$

$$\epsilon_C^{(4*)} = \max(0, \epsilon^{(4)} - \zeta_C \epsilon^{(2)}) \quad (2.58)$$

L'équation 2.58 traduit le fait que cet opérateur est appliqué partout où la viscosité artificielle d'ordre 2 ne l'est pas et est ajustable par l'utilisateur par le biais de la variable $\epsilon^{(4)}$.

Les senseurs ζ_C ont été introduits par Jameson [38]. Ils sont calculés pour chaque cellule et leurs valeurs sont comprises entre 0 et 1. Leur objectif est de n'être non nul que dans les zones où des problèmes de stabilité numérique apparaissent. Deux senseurs sont disponibles dans AVBP, celui de Jameson [38] développé pour des simulations stationnaires et celui de Colin [15] qui est une adaptation moins dissipative du précédent pour les calculs de LES transitoires.

Dans AVBP on appelle modèle de viscosité artificielle la combinaison des variables à partir desquelles les valeurs des senseurs sont calculées et les équations dans lesquelles sont appliqués les opérateurs de viscosité artificielle. Le modèle associé au senseur de Colin ayant pour but d'effectuer des calculs LES, utilise l'énergie totale et les fractions massiques pour calculer le senseur. Les viscosités artificielles sont appliquées dans les équations de conservation de la masse et de l'énergie mais seule la viscosité artificielle d'ordre 2 est appliquée à l'équation de quantité de mouvement. Ainsi aucune dissipation de fond n'est introduite dans cette équation.

2.2.4 Gestion du maillage mobile : ALE et ITC

Le domaine fluide dans un moteur à combustion interne présente de fortes déformations : le volume de gaz dans le cylindre varie d'un facteur 10 (taux de compression) au cours du cycle et les soupapes passent d'une position fermée à une levée d'environ 8 mm. Les méthodes numériques utilisées doivent être adaptées et assez robustes pour traiter de telles déformations. En mécanique des milieux continus il y a deux représentations mathématiques de l'écoulement d'un fluide : la description Lagrangienne où l'on s'intéresse aux trajectoires de particules individuelles et la description Eulérienne où l'on s'intéresse aux grandeurs du fluide en un point fixe de l'espace (référentiel du laboratoire). C'est le formalisme généralement utilisé en CFD ; toutes les équations du présent chapitre utilisent cette description.

Par analogie on parle de méthode de mouvement de maillage Lagrangienne quand les nœuds suivent le mouvement des points matériels et Eulérien quand les mailles sont fixes. La méthode ALE (Arbitrary Lagrangian Eulerian) apporte une correction au schéma numérique afin

de prendre en compte le mouvement des nœuds du maillage. Elle permet au sein d'un même maillage d'avoir des mailles fixes (Eulériennes), des mailles se déplaçant à la vitesse du milieu (Lagrangiennes) et des mailles avec un déplacement arbitraire. Initialement proposée par Noh [39] et Hirt et al. [40] elle a pour but de combiner les avantages de ces deux méthodes en minimisant leurs inconvénients.

On applique un résidu correctif venant du fait que les opérateurs intégrale et dérivée ne commutent plus lors de l'intégration de l'équation de Navier Stokes 2.4 :

$$\int_{C_j(t)} \frac{\partial}{\partial t} W dv + \int_{C_j(t)} \nabla \cdot F dv = 0 \quad (2.59)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{C_j(t)} W dv + \int_{C_j(t)} \nabla \cdot (F - \dot{X}W) dv = 0 \quad (2.60)$$

où \dot{X} est la vitesse de déplacement des nœuds du maillage (représentée sur la figure 2.2(a)) supposée constante au cours d'une itération. En intégrant entre t_n et t_{n+1} on a :

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \frac{\partial}{\partial t} \int_{C_j(t)} W dv dt + \int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_{C_j(t)} \nabla \cdot (F - \dot{X}W) dv dt = 0 \quad (2.61)$$

$$|C_j^{n+1}|W_j^{n+1} - |C_j^n|W_j^n + \int_{t_n}^{t_{n+1}} Q_i(t) dt = 0 \quad (2.62)$$

$$\text{avec } Q_i(t) = \int_{C_j(t)} \nabla \cdot (F - \dot{X}W) dv$$

L'approximation de Q_i dépend du schéma numérique utilisé. La dérivation de la méthode ALE pour les schémas numériques d'AVBP est décrite par Moureau et al. [29, 41].

Le mouvement de maillage est effectué par la méthode ITC (Interpolation Temporelle Conditionnée) qui fournit à un temps donné la position X et la vitesse \dot{X} de chaque nœud du maillage. Il est nécessaire de fournir au code le maillage de départ et le maillage final, ainsi le déplacement total de chaque nœud est connu $d_j^{tot} = \|x_j(t_{init}) - x_j(t_{final})\|$. Pour chaque pas de temps on calcule alors un taux de déplacement P_j^n .

$$P_j^n = \frac{d_j^n}{d_j^{tot}} \quad (2.63)$$

Ce taux de déplacement est connu sur les surfaces mobiles et nul sur les parois fixes. Il est calculé sur les nœuds intérieurs du maillage par un processus itératif basé sur un solveur de Laplace :

$$\Phi = \frac{\sum_{m=1}^M (1 - \Phi_m^2) \Phi_m}{\sum_{m=1}^M (1 - \Phi_m^2)} \quad (2.64)$$

où M est le nombre de nœuds voisins et Φ s'exprime en fonction des taux de déplacement P_j

$$\Phi_j = \frac{P_j^n - P_j^{n-1}}{1 - P_j^{n-1}} \quad (2.65)$$

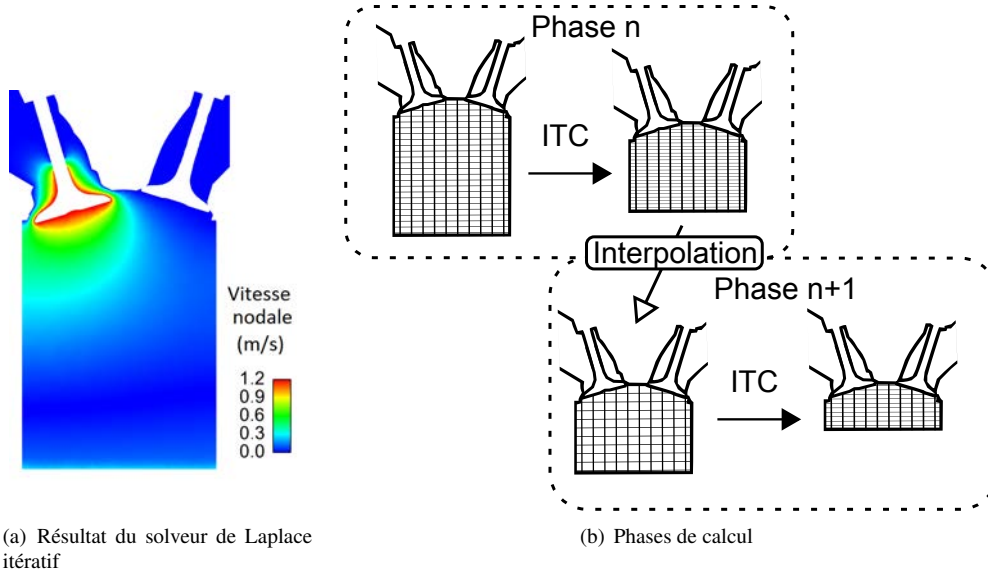


FIGURE 2.2 – Gestion du mouvement de maillage dans AVBP

On obtient ainsi un champ de déplacement lisse pondéré par les valeurs aux parois présenté sur la figure 2.2(a). Plus le maillage est déformé plus sa qualité est faible, lorsque la qualité du maillage est trop faible (environ 30% du déplacement du piston ou des soupapes) on interpole la solution vers un nouveau maillage que l'on peut recommencer à déformer. Notons que les hexaèdres présentent ici un gros avantage sur les tétraèdres car ils permettent des taux de déformation plus importants avant d'avoir recours à l'interpolation. Ainsi un cycle moteur complet se décompose en plusieurs phases de calcul représentées sur la figure 2.2(b). Un cycle moteur utilise 41 maillages au chapitre 4 et 66 au chapitre 5.

2.2.5 Conditions aux limites

Les conditions aux limites permettent de fermer un problème mathématique en spécifiant les valeurs que doivent prendre la solution ou ses dérivées aux frontières du domaine de calcul. La qualité de la solution dépend donc fortement du choix des conditions aux limites. Pour la simulation des équations de Navier Stokes, des conditions aux limites assurant d'avoir un problème mathématiquement bien posé ne donnent pas assez d'informations pour pouvoir les appliquer dans un code de calcul. En effet d'autres variables que celles déterminées par la condition aux limites sont nécessaires au schéma numérique. On les appelle conditions aux limites numériques. De plus la simulation d'écoulements compressibles en LES nécessite un contrôle précis des propriétés acoustiques des conditions aux limites D'un point de vue numérique, où l'espace et le temps sont discrétisés, l'avancée temporelle d'un nœud se fait en utilisant les valeurs aux nœuds adjacents.

$$W_j^{n+1} = W_j^n - r_j(W_{k \in D_j}) \Delta t \quad (2.66)$$

L'équation 2.66 exprime l'avancée en temps des variables conservatives W_j au nœud j par le schéma numérique (cf. 2.2.2), D_j étant l'ensemble des nœuds voisins de j . Les nœuds du bord ne peuvent alors pas être mis à jour par le schéma numérique car les valeurs des nœuds hors du domaine manquent pour calculer le résidu $r_{j \in \partial\Omega}$. Dans la suite nous appellerons fantômes les éléments de maillage hors du domaine de calcul.

Dans AVBP le schéma numérique calcule les résidus du bord dans un premier temps sans les valeurs des nœuds fantômes. On obtient alors des résidus dits prédits $r_{j \in \partial\Omega}^p$. Il faut ensuite corriger ces valeurs $r_{j \in \partial\Omega}^c$ afin d'obtenir la condition aux limites désirée. Le code peut ensuite faire la mise à jour temporelle des variables aux nœuds du bord avec 2.66.

Il reste à déterminer la manière dont les résidus vont être corrigés. La technique classique consiste à imposer les grandeurs cibles de la condition aux limites et à laisser les valeurs prédites pour toutes les autres variables. Dans cette thèse deux méthodes sont utilisées pour effectuer cette opération : les conditions aux limites caractéristiques [42] dont le principe est abordé dans la section 2.3.3 et les lois de paroi [43–45].

Lois de paroi

L'une des difficultés des simulations LES concerne le traitement de l'écoulement proche parois [46]. En effet, dans la couche limite turbulente, il existe des échelles turbulentes susceptibles de produire de l'énergie cinétique. Or dans ces régions, nous faisons le choix de ne pas raffiner le maillage pour ne pas pénaliser le temps de calcul. Ainsi le maillage est trop gros pour résoudre ces échelles et les modèles de sous maille utilisés ne prennent en compte que la dissipation d'énergie cinétique. Pour éviter de surestimer la dissipation aux parois, il est nécessaire de prendre en compte le mécanisme de production. Dans la formulation Cell-Vertex d'AVBP, les nœuds du bord coïncident avec la paroi. Pour l'utilisation de loi de paroi on fait l'hypothèse que ces nœuds sont en fait à une distance δ de la paroi suffisamment petite pour être négligeable devant la distance inter nœuds. Ainsi la vitesse au nœud n'est pas égale à celle de la paroi mais calculée par la loi de paroi. Dans la couche limite on fait les hypothèses suivantes :

- les variables ne dépendent que de la direction normale à la paroi
- les propriétés thermodynamiques du fluide sont constantes
- le gradient de pression est négligeable
- le frottement et le flux de chaleur sont constants

La loi de paroi s'écrit

$$\begin{cases} u^+ = y^+ & \text{pour } y^+ \leq 11 \\ u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + C & \text{pour } y^+ > 11 \end{cases} \quad (2.67)$$

$$\text{avec } y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu}, \quad u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad \text{et} \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}} \quad (2.68)$$

où u_τ est la vitesse de friction, τ_w le frottement pariétal, $\kappa = 0.41$ et $C = 5.5$.

2.2.6 Modélisation LES de la combustion turbulente

Dans les moteurs à allumage commandé, la combustion est déclenchée par l'arc électrique formé aux électrode d'une bougie. La flamme se propage alors dans les gaz frais jusqu'à s'éteindre contre les parois du cylindre. On parle de combustion prémélangée dans les moteurs à injection indirecte et de combustion partiellement prémélangée ou de flamme de diffusion dans les moteurs à injection directe. Quel que soit le type de flamme rencontrée dans un moteur, la turbulence est primordiale car elle permet d'accélérer la phase de combustion et ainsi de consommer tout le carburant à temps. En effet si les soupapes d'échappement s'ouvrent avant la fin de la combustion, une partie du carburant est directement perdue et le cycle produit moins d'énergie. Dans le cadre de simulations LES de moteurs, une modélisation précise du phénomène de combustion est nécessaire à l'obtention de résultats prédictifs. Dans cette thèse seuls des cas de combustion prémélangée seront étudiés. Les combustions prémélangées turbulentes peuvent présenter plusieurs régimes en fonction du rapport des propriétés de la flamme aux propriétés de la turbulence. En moteur, l'épaisseur de flamme δ_l est d'environ 0,1 mm, ce qui est petit par rapport à l'échelle intégrale de la turbulence l_t (1 à 10 mm) [14]. La vitesse de flamme laminaire s_l est également faible par rapport aux fluctuations de vitesse u' , Vermorel et al. [7] estime $1 < u'/s_l < 10$. Ainsi, en se basant sur le diagramme 2.3, l'hypothèse que la combustion se produit en régime de flammelette dans les moteurs est généralement admise. Le rôle du modèle de combustion est d'exprimer le

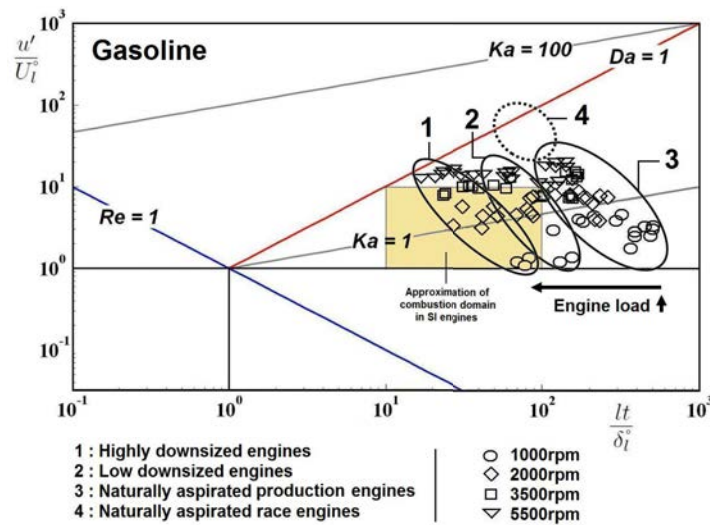


FIGURE 2.3 – Diagramme de régime de combustion turbulente prémélangée [47] avec les données de calcul issues de [48]

taux de réaction des espèces \dot{w}_k de l'équation 2.4. Il faut associer à un modèle de combustion un modèle d'allumage qui simule le déclenchement de la combustion par l'arc électrique de la bougie. Le code AVBP possède deux modèles pour assurer la propagation de flammes de prémélange en LES : TFLES et ECFM-LES. Le modèle de flamme épaissie TFLES [49] (Thickened Flame for LES) est basé sur l'épaississement artificiel du front de flamme par un facteur F . Ce modèle

couplé au modèle d'allumage ED (Energy Deposition) [50, 51] a été utilisé pour des simulations moteur dans [8, 9, 52]. Le modèle ECFM-LES est lui basé sur la propagation d'une densité de surface de flamme. Il a été utilisé pour des calculs moteur dans les études [6, 14] avec le modèle d'allumage ATKIM [53] puis dans [13] avec le modèle d'allumage ISSIM-LES [16] couplé au modèle d'auto-allumage TKI-LES [54]. Dans le cadre de cette thèse le modèle de combustion ECFM-LES associé au modèle d'allumage ISSIM-LES seront utilisés et sont décrits dans la suite de cette section.

2.2.6.1 Le modèle ECFM-LES

Le formalisme ECFM-LES (Extended Coherent Flame Model for LES) est basé sur l'hypothèse de flamme infiniment mince. Les gaz présents sont donc soit des gaz frais, soit des gaz brûlés (GB). On peut alors définir une variable de progrès c qui passe instantanément de 0 dans les gaz frais à 1 dans les gaz brûlés. Il n'est pas envisageable de résoudre la flamme (dont l'épaisseur typique est d'environ 0.1 mm) sur un maillage LES dont les mailles sont de l'ordre de 0.5 mm (correspondant approximativement à la taille du filtre LES Δ_x). C'est pourquoi un nouveau filtre de taille $\hat{\Delta} \in [5\Delta_x, 10\Delta_x]$ (Fig. 2.4) supérieure au filtre LES Δ_x est utilisé dans ECFM-LES. Ce filtre permet ainsi d'augmenter la résolution du front de flamme, qui est en pratique résolu sur 5 à 10 cellules.

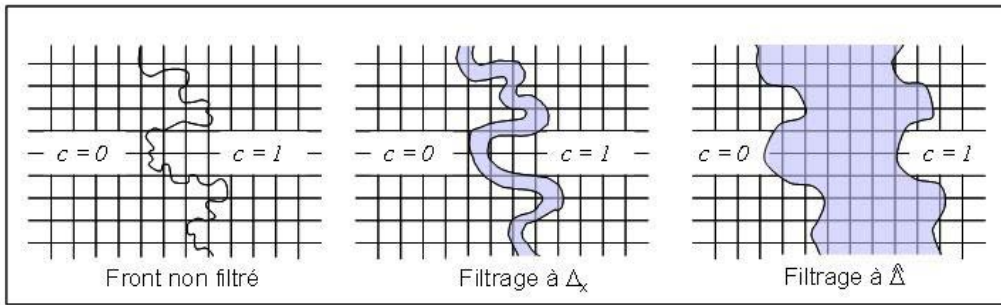


FIGURE 2.4 – Principe du filtrage du front de flamme à l'échelle $\hat{\Delta}$.

On rappelle ici l'équation de transport des espèces filtrée 2.40 en prenant en compte le modèle de fermeture pour le transport convectif non résolu :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} = -\nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{\mathbf{u}} \tilde{Y}_k) - \nabla \cdot (\bar{\mathbf{J}}_k + \bar{\mathbf{J}}_k^t) + \bar{\rho} \tilde{\omega}_k \quad (2.69)$$

$$\text{avec} \quad \bar{\mathbf{J}}_k = \bar{\rho} \frac{\nu}{Sc} \nabla \tilde{Y}_k \quad \text{et} \quad \bar{\mathbf{J}}_k^t = \bar{\rho} \frac{\hat{\nu}_t}{Sc^t} \nabla \tilde{Y}_k$$

où Sc_t et Sc représentent respectivement les nombres de Schmidt moléculaire et turbulent (cf. §2.1.5). ν est la viscosité cinématique moléculaire et $\hat{\nu}_t$ est la viscosité cinématique turbulente dont le calcul est basé sur l'échelle du filtre $\hat{\Delta}$ grâce à la formule :

$$\hat{\nu}_t = C_v \hat{u}' \hat{\Delta} \quad (2.70)$$

\hat{u}' est alors estimé à partir des fluctuations de sous-maille u' avec l'hypothèse de la cascade de Kolmogorov :

$$\hat{u}' = u' \left(\frac{\hat{\Delta}}{\Delta_x} \right)^{1/3} \quad (2.71)$$

et

$$u' = \frac{\nu_t}{C_\nu} \Delta_x \quad \text{avec } C_\nu = 0.12. \quad (2.72)$$

Il convient maintenant d'exprimer le taux de réaction des espèces $\tilde{\omega}_i$. Dans l'approche à densité de surface de flamme (FSD pour Flame Surface Density), ce taux de réaction s'écrit :

$$\tilde{\rho} \tilde{\omega}_k = \rho^u \tilde{Y}_k^u |_{\tilde{u}} S_l \bar{\Sigma} \quad (2.73)$$

avec ρ^u la masse volumique des gaz frais, S_l la vitesse de flamme laminaire et $\bar{\Sigma}$ la densité de surface de flamme. $\tilde{Y}_k^u |_{\tilde{u}}$ représente la fraction massique de l'espèce k (carburant ou O_2) dans les gaz frais. Pour déterminer la composition des gaz frais dans les cellules où il y a des gaz frais et des gaz brûlés, on utilise des traceurs de carburant vapeur et de dioxygène. L'évolution de ces "espèces fictives" est obtenue grâce à une équation de transport (sans terme source), il est alors possible de décrire l'évolution qu'aurait eu le mélange air-carburant sans combustion. La fraction massique $\tilde{Y}_k^u |_{\tilde{u}}$ de l'espèce k (notée par la suite \tilde{Y}_{TF} pour le carburant et \tilde{Y}_{TO_2} pour le dioxygène) correspond donc au rapport de la masse m_k^u de l'espèce k dans les gaz frais sur la masse m^u des gaz frais présents dans la maille :

$$\tilde{Y}_k^u |_{\tilde{u}} = \frac{m_k^u}{m^u} \quad (2.74)$$

La vitesse laminaire S_l est calculée à partir de la corrélation de Metghalchi et Keck [55], généralisée aux mélanges contenant des EGR [56] :

$$S_l = S_l^0 \left(\frac{T_u}{T_0} \right)^\alpha \left(\frac{P_u}{P_0} \right)^\beta (1 - 2.1\chi_{EGR}) \quad (2.75)$$

où S_l^0 définit la vitesse de combustion laminaire non étirée dans les conditions thermodynamiques de références ($T_0 = 298$ K et $p_0 = 1$ atm) et χ_{EGR} le taux massique de gaz diluants. Les coefficients α et β sont définis dépendent de la richesse du mélange ϕ et de la nature du carburant. Ils sont donnés ici pour l'isooctane :

$$\alpha(\phi) = 2.18 - 0.8(\phi - 1) \quad (2.76)$$

$$\beta(\phi) = -0.16 + 0.22(\phi - 1) \quad (2.77)$$

La densité de surface de flamme est obtenue via la résolution de l'équation de transport 2.78 proposée pour la LES par Richard & al. [14, 57]

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} + \underbrace{\nabla \cdot (\tilde{\mathbf{u}} \bar{\Sigma})}_{T_{res}} &= \underbrace{\nabla \cdot \left(\sigma_c \left(\frac{\nu}{Sc} + \frac{\hat{\nu}_t}{Sc_t} \right) \nabla \bar{\Sigma} \right)}_{T_{sgs}} + \underbrace{(\nabla \cdot \tilde{\mathbf{u}} - \mathbf{nn} : \nabla \tilde{\mathbf{u}}) \bar{\Sigma}}_{S_{res}} + \underbrace{\frac{\Gamma}{\sigma_c} \frac{\hat{u}'}{\hat{\Delta}} \bar{\Sigma}}_{S_{sgs}} \\
&\quad - \underbrace{\nabla \cdot (S_d \mathbf{N} \bar{\Sigma})}_P + \underbrace{S_d (\nabla \cdot \mathbf{N}) \bar{\Sigma}}_{C_{res}} \\
&\quad + \underbrace{\beta S_l \frac{c^* - \bar{c}}{\bar{c}(1 - \bar{c})} (\bar{\Sigma} - \bar{\Sigma}_{lam}) \bar{\Sigma}}_{C_{sgs}}
\end{aligned} \tag{2.78}$$

T_{res} , S_{res} , C_{res} et P sont respectivement les termes de transport, d'étirement, de courbure et de propagation dus à l'écoulement résolu sur le maillage. Les termes T_{sgs} , S_{sgs} et C_{sgs} sont respectivement les termes de sous-maille pour le transport, l'étirement et la courbure.

- Le terme de transport résolu T_{res} caractérise la convection par le champ de vitesse résolu.
- Le terme de transport de sous-maille T_{sgs} modélise la convection due aux petites échelles. Il est écrit comme une diffusion turbulente à l'échelle $\hat{\Delta}$

$$T_{sgs} = \nabla \cdot \left(\sigma_c \left(\frac{\nu}{Sc} + \frac{\hat{\nu}_t}{Sc_t} \right) \nabla \bar{\Sigma} \right) \tag{2.79}$$

σ_c représente le facteur d'épaississement de la flamme qui est imposé à 1 dans cette étude. En effet, le confinement de la combustion en moteur automobile induit un temps de propagation de la flamme court. Elle n'a pas le temps de se raidir, ni de s'épaissir et la valeur $\sigma_c = 1$, qui intervient dans l'Eq. 2.80, permet également d'obtenir le bon étirement de sous-maille S_{sgs} .

- L'étirement résolu S_{res} correspond au taux d'étirement de la flamme engendré par les tourbillons résolus.
- L'étirement de sous-maille S_{sgs} représente l'influence des structures de tailles inférieures à $\hat{\Delta}$.

$$S_{sgs} = \frac{\Gamma}{\sigma_c} \frac{\hat{u}'}{\hat{\Delta}} \bar{\Sigma} \tag{2.80}$$

où Γ est une fonction d'efficacité dont le calcul est basé sur les fluctuations de vitesse turbulente \hat{u}' à l'échelle $\hat{\Delta}$. L'expression de cette fonction a été proposée par Charlette & al. [58] et modifiée par Richard & al. [57].

- Le terme de propagation P et le terme de courbure résolue C_{res} assurent la propagation laminaire de la flamme quand la turbulence de sous-maille est trop faible. Ils sont donnés par les équations :

$$P = \nabla \cdot (S_d \mathbf{N} \bar{\Sigma}) \tag{2.81}$$

$$C_{res} = S_d (\nabla \cdot \mathbf{N}) \bar{\Sigma} \tag{2.82}$$

Leurs expressions sont basées sur la normale \mathbf{N} à l'iso-surface de la variable de progrès filtrée \tilde{c} :

$$\mathbf{N} = -\frac{\nabla\tilde{c}}{|\nabla\tilde{c}|} \quad (2.83)$$

S_d est la vitesse définie par :

$$S_d = -(1 + \tau\tilde{c})S_l \quad (2.84)$$

avec $\tau = \frac{\rho^u}{\rho^b} - 1$ l'expansion thermique à travers le front de flamme où ρ^u et ρ^b sont les masses volumiques des gaz frais et brûlés.

- Le terme de courbure sous-maille C_{sgs} représente l'influence de la courbure non résolue sur le plissement du front de flamme :

$$C_{sgs} = \beta S_l \frac{c^* - \bar{c}}{\bar{c}(1 - \bar{c})} (\bar{\Sigma} - \bar{\Sigma}_{lam}) \bar{\Sigma} \quad (2.85)$$

Pour calculer ce terme, la variable de progrès filtrée au sens de Reynolds est estimée à l'aide de l'expression :

$$\bar{c} = \tilde{c} \frac{\bar{\rho}}{\rho^b} \quad (2.86)$$

Les valeurs des constantes sont $\beta = 4/3$ et $c^* = 0.5$, et $\bar{\Sigma}_{lam}$ est la partie laminaire de la FSD définie par :

$$\bar{\Sigma}_{lam} = |\nabla\tilde{c}| + (\bar{c} - \tilde{c}) \nabla \cdot \mathbf{N} \quad (2.87)$$

2.2.6.2 Le modèle d'allumage Imposed Stretch Spark Ignition Model (ISSIM-LES)

Pour représenter le fonctionnement d'un moteur essence, l'allumage du mélange air-carburant doit être simulé. En réalité, l'allumage est réalisé à l'aide de systèmes inductifs permettant de générer une étincelle dans la chambre de combustion. La vie de cette étincelle se décompose en trois phases :

- la phase de claquage
- la phase de création d'un arc électrique
- la phase d'initiation de la combustion du mélange

Pour représenter l'ensemble de ces phénomènes, le modèle choisi dans cette thèse est le modèle ISSIM-LES [16]. La modélisation numérique se décompose en deux phases qui font l'objet des deux paragraphes suivants :

- Le dépôt d'un noyau initial de gaz brûlés : le circuit électrique aboutissant au claquage de la bougie est modélisé, permettant ainsi de connaître la masse et le volume de gaz brûlés à déposer au moment de l'allumage.
- La croissance du noyau initial, et la transition vers le modèle de combustion ECFM-LES

Modélisation du noyau initial de gaz brûlés

Lorsque l'ordre d'allumage est donné au temps t_{spark} , une tension est appliquée à la bougie et un arc électrique est initié entre ses électrodes. À partir de cet instant, le modèle calcule la puissance électrique et l'énergie fournie au gaz environnant à chaque pas de temps ainsi qu'une énergie critique d'allumage $E_c(t)$. L'allumage réussit dès que l'énergie fournie au gaz est supérieure à l'énergie critique d'allumage. On trouve le temps d'allumage $t_{\text{ign}} \geq t_{\text{spark}}$ quand $E(t_{\text{ign}}) \geq E_c(t_{\text{ign}})$. Une masse de gaz brûlés m_b^{ign} (de volume V_b^{ign}) est alors créée entre les deux électrodes. Sa valeur est estimée dans le voisinage de la bougie à partir de l'épaisseur de flamme laminaire δ_L et de la longueur de l'arc électrique l_{spark} :

$$m_b^{\text{ign}} = \langle \rho^u l_{\text{spark}} 4\pi \delta_L^2 \rangle \quad (2.88)$$

Pour s'assurer de la bonne résolution de la flamme sur le maillage, la sphère de gaz brûlés est filtrée à l'échelle du filtre de combustion $\hat{\Delta}$, et déposée sur un rayon r_b^{ign} (supérieur au rayon initial réel de la flamme) défini comme :

$$r_b^{\text{ign}} = \left(\frac{3}{4\pi} \int \bar{c}_{\text{ign}} dV \right)^{1/3} \quad (2.89)$$

où la variable d'avancement initiale \bar{c}_{ign} a une forme gaussienne centrée sur la position de la bougie $x_{\text{spark}lg}$

$$\bar{c}_{\text{ign}} = C_0 \exp \left(- \left(\frac{|x - x_{\text{spark}lg}|}{0.6\hat{\Delta}} \right)^2 \right) \quad (2.90)$$

et C_0 est une constante vérifiant

$$\begin{aligned} \int \bar{c}_{\text{ign}} dV &= V_b^{\text{ign}} \\ &= \frac{4}{3} \pi (r_b^{\text{ign}})^3 \end{aligned} \quad (2.91)$$

Afin de prendre en compte l'allumage, le taux de réaction $\bar{\omega}_c$ s'écrit

$$\bar{\omega}_c = \max \left(\rho^u S_l \bar{\Sigma}_{\bar{c}}, \rho_b \frac{(\bar{c}_{\text{ign}} - \bar{c})}{dt} \right) \quad (2.92)$$

où dt est le pas de temps.

Dans l'équation de FSD, l'allumage est pris en compte par l'ajout du terme source

$$\bar{\omega}_{\Sigma}^{\text{ign}} = \max \left(0, \frac{\Sigma_{\text{ign}} - \bar{\Sigma}_{\bar{c}}}{dt} \right) \quad (2.93)$$

avec $\Sigma_{\text{ign}} = \frac{3\bar{c}}{r_b^{\text{ign}}}$ de manière à retrouver la surface initiale de la sphère déposée

$$\int \Sigma_{\text{ign}} dV = \int 3(r_b^{\text{ign}})^{-1} \bar{c}_{\text{ign}} dV \quad (2.94)$$

$$= 3(r_b^{\text{ign}})^{-1} \frac{4}{3} \pi (r_b^{\text{ign}})^3 \quad (2.95)$$

$$= 4\pi (r_b^{\text{ign}})^2 \quad (2.96)$$

Il est important de noter que cette phase de dépôt du noyau est extrêmement courte (de l'ordre de quelques itérations) et le modèle développé dans la partie suivante assure de suite la croissance du noyau.

Croissance du noyau et propagation de la flamme

Le modèle ISSIM-LES permet une transition progressive du modèle d'allumage vers le modèle de combustion ECFM-LES en modifiant directement l'équation de transport de la FSD. En effet, immédiatement après le dépôt du noyau, le rayon réel de la flamme r_b est plus petit que la taille des mailles. Les termes de courbure et d'étirement résolus doivent être nuls et la création de densité de surface de flamme par ce noyau doit être modélisée. Pour assurer la transition progressive d'un modèle à l'autre on introduit un coefficient de pondération $\alpha(x, t)$ qui est nul au début de l'allumage et vaut 1 quand la flamme est établie.

$$\alpha(x, t) = \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{r_b^+ - 1.0}{0.015} \right) \right) \quad \text{avec} \quad r_b^+ = \frac{r_b}{0.65\hat{\Delta}} \quad (2.97)$$

L'équation de transport de la FSD 2.78 s'écrit alors avec les termes d'allumages

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t} &= T_{res} + T_{sgs} + S_{sgs} \\ &+ \alpha C_{sgs} - \nabla \cdot (\alpha S_d \mathbf{N} \bar{\Sigma}) + \alpha (C_{res} + S_{res}) \\ &+ (1 - \alpha) C_{sgs}^{ign} + \bar{\omega}_{\Sigma}^{ign} \end{aligned} \quad (2.98)$$

où T_{res} , T_{sgs} , S_{res} , S_{sgs} , C_{res} et C_{sgs} sont les termes introduits dans l'équation 2.78. Au début de l'allumage, le coefficient de pondération α permet d'annuler les termes résolus $-\nabla \cdot (S_d \mathbf{N} \bar{\Sigma})$, C_{res} et S_{res} de l'équation 2.98. Le terme de courbure de sous-maille C_{sgs} est remplacée par l'expression analytique exacte :

$$C_{sgs}^{ign} = \frac{2}{r_b} (1 + \tau) \Xi S_l \bar{\Sigma} \quad (2.99)$$

Lorsque l'allumage est terminé, le coefficient α est égal à 1. A cet instant, la valeur de r_b^+ est proche de l'unité, et la taille du rayon réel r_b est donc de l'ordre de grandeur de la taille du filtre de la combustion $\hat{\Delta}$. Le terme lié à l'allumage s'annule dans l'équation 2.98, et le modèle ECFM-LES assure la propagation de la flamme.

L'équations 2.99 intègre dans leur calcul le facteur de plissement Ξ qui est estimé, dans le cas d'une flamme totalement résolue, par

$$\Xi = \bar{\Sigma} |\nabla \bar{c}|^{-1} = (\bar{\Sigma}_{\bar{c}} - \nabla \cdot ((\bar{c} - \bar{c}) N)) |\nabla \bar{c}|^{-1} \quad (2.100)$$

Lors de l'allumage, le noyau de flamme débute sa croissance en sous-maille avant d'être résolu, il est donc nécessaire de modéliser l'évolution de ce plissement durant les premiers instants. En considérant en première approximation que la turbulence est faible et que le plissement du noyau est limité après l'allumage, $\Xi = 1$ a été choisi. Cependant, le plissement Ξ intervient dès les premiers instants après l'allumage, et une petite erreur de modélisation à ce stade aura des répercussions sur tout le déroulement de la combustion qui suit. Pour lever cette hypothèse, une expression du plissement a été développée par analogie avec les calculs RANS dans [13].

2.3 Modélisation 1D : développement du code Flow1D

L'objectif de réaliser des simulations LES tridimensionnelles couplées à des simulations 1D dans un cadre de calcul haute performance entraîne de fortes contraintes sur le code 1D à utiliser. Afin d'effectuer les tests pour le développement du couplage, une grande liberté est nécessaire au niveau des modèles et du numérique du code. La partie informatique doit aussi être suffisamment flexible pour la gestion des communications avec le code 3D. C'est pourquoi le développement d'un nouveau code a été choisi plutôt que l'utilisation d'un code du commerce ou d'un code open source. Ce code doit pouvoir simuler en 1D les écoulements existant dans les moteurs (multi-espèce, haute température, section variable) et modéliser les éléments que l'on peut trouver dans ces systèmes. De plus il doit fonctionner en parallèle du code 3D et être capable de communiquer avec lui pour effectuer un couplage dans au moins deux zones : l'admission et l'échappement. Cette section décrit les différents modèles ainsi que les méthodes numériques du code que l'on nommera Flow1D et qui a été développé au cours de cette thèse.

2.3.1 Équations d'Euler quasi-1D

La simulation d'écoulement dans des tubulures pour lesquelles la longueur est très grande devant le diamètre hydraulique permet d'utiliser l'hypothèse monodimensionnelle. Les tubulures ayant une section variable $S(x)$ on utilise les équations d'Euler quasi-1D [59, 60]

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} [\rho_k S] + \frac{\partial}{\partial x} [\rho_k u S] &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} [\rho u S] + \frac{\partial}{\partial x} [(\rho u^2 + p) S] - p \frac{\partial S}{\partial x} + f |u| \rho u \sqrt{\pi S} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} [\rho E S] + \frac{\partial}{\partial x} [(\rho E + p) u S] - 2h_c (T_{wall} - T) \sqrt{\pi S} &= 0 \end{aligned} \quad (2.101)$$

Les transferts thermiques et le frottement aux parois sont modélisés par le biais des coefficients de convection h_c et de frottement f . Ces deux coefficients sont calculés en fonction des nombres de Reynolds Re et de Prandtl Pr en se basant sur le diagramme de Moody [61].

$$h_c = Nu \frac{\lambda}{D} \quad (2.102)$$

$$Nu = \begin{cases} 0.5 f_r Re Pr & \text{si } Re \in [0, 3500] \\ 9.2 Re^{0.2} & \text{si } Re \in]3500, 7115] \\ 0.07 Re^{3/4} & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.103)$$

$$f_r = \min \left(0.25, \max \left(0.005, \frac{16}{Re} \right) \right)$$

où D est le diamètre du tube

$$f = \begin{cases} f_l & \text{si } Re \in [0, 2000] \\ (1 - \beta) f_l + \beta f_t & \text{si } Re \in]2000, 6000] \\ f_t & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.104)$$

$$f_t = \max\left(10, \frac{64}{Re}\right) \quad f_t = \left[2 \log\left(\frac{c_r}{3.7D} + 5.74Re^{-0.9}\right)\right]^{-2}$$

$$\alpha = \frac{Re}{4000} - \frac{1}{2} \quad \beta = \frac{1}{2} \left(\alpha \frac{3 + \alpha^2}{1 + 3\alpha^2} + 1\right)$$

avec c_r le coefficient de rugosité du tube défini par l'utilisateur (cf. table 2.1). Ces deux formules

laiton cuivre	1.5 μm
acier commercial	45 μm
fer forgé à fer galvanisé	45 μm à 150 μm
fonte	260 μm
béton	0.3 à 3 mm

TABLE 2.1 – Exemples de valeurs du coefficient de rugosité pour différents matériaux

présentent une zone laminaire, une zone de transition et une zone turbulente.

2.3.2 Schémas numériques

Écrivons le système d'équations 2.101 sous forme vectorielle

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial x} + C = 0 \quad (2.105)$$

avec

$$W = \begin{bmatrix} \rho S \\ \rho u S \\ \rho E S \end{bmatrix}, F = \begin{bmatrix} \rho u S \\ \rho u^2 S + p S \\ (\rho E + p) u S \end{bmatrix} \text{ et } C = \begin{bmatrix} 0 \\ -p \frac{\partial S}{\partial x} + f |u| \rho u \sqrt{\pi S} \\ -2h_c (T_{wall} - T) \sqrt{\pi S} \end{bmatrix}$$

2.3.2.1 Lax-Wendroff two step (LW2S)

Le domaine est discrétisé en N mailles et les grandeurs sont stockées au centre des mailles. Le schéma numérique est le Lax-Wendroff deux étapes proposé par Richtmyer et Morton [62] et modifié par Basset et al. [63] afin de prendre en compte les termes sources :

$$W_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} (W_{i+1}^n + W_i^n) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} (F_{i+1}^n - F_i^n) - \frac{\Delta t}{4} (C_{i+1}^n + C_i^n) \quad (2.106)$$

$$W_i^{n+1} = W_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(F_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} - F_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) - \frac{\Delta t}{2} \left(C_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} + C_{i-\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \right) + \left(D_{j+\frac{1}{2}}^n - D_{j-\frac{1}{2}}^n \right) \quad (2.107)$$

où $F_i^n = F(W_i^n)$. C'est un schéma explicite qui présente un critère de stabilité :

$$\frac{(|u| + a) \Delta t}{\Delta x} < 1 \quad (2.108)$$

Le schéma est d'ordre 2 en temps et en espace et génère des instabilités lorsque les grandeurs de l'écoulement présentent de forts taux de variation. Ce problème, commun à tous les schémas

centrés d'ordre supérieur à 1, peut être évité en limitant le flux $F_{i+\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$. On utilise un limiteur de flux développé par Davis [64] que l'on applique par l'intermédiaire d'une correction $D_{i+\frac{1}{2}}^n$ [65] :

$$D_{j+\frac{1}{2}}^n = \frac{1}{2}C(\nu_j) [2 - \phi(\zeta_j^+) - \phi(\zeta_{j+1}^-)] \Delta W_{j+\frac{1}{2}}^n \quad (2.109)$$

avec

$$\begin{aligned} \Delta W_{j+\frac{1}{2}}^n &= W_{j+1}^n - W_j^n \\ C(\nu) &= \min\{\nu(1-\nu), 0.25\} \\ \nu &= \rho [\mathbb{A}(W_j)] \frac{\Delta t}{\Delta x} \end{aligned}$$

où $\mathbb{A}(U)$ est la matrice jacobienne de F et $\rho[\mathbb{A}(U)]$ son rayon spectral. ζ^+ et ζ^- sont des senseurs qui caractérisent les fortes variations dans les variables conservatives W .

$$\zeta_j^+ = \frac{\Delta W_{j-\frac{1}{2}} \cdot \Delta W_{j+\frac{1}{2}}}{\Delta W_{j+\frac{1}{2}} \cdot \Delta W_{j+\frac{1}{2}}}, \quad \zeta_j^- = \frac{\Delta W_{j+\frac{1}{2}} \cdot \Delta W_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta W_{j-\frac{1}{2}} \cdot \Delta W_{j-\frac{1}{2}}} \quad (2.110)$$

Les limiteurs de flux sont les fonctions $\phi(\zeta)$, qui à un taux de variation associent une correction. Il existe de nombreux limiteurs de flux dont les propriétés diffèrent et le choix dépend de l'application et du schéma numérique utilisé. Ce choix est souvent fait sur une base essais erreur. Ici c'est le limiteur de Davis 2.111 qui a été sélectionné pour sa faible dissipation et la robustesse obtenue avec le Lax-Wendroff deux étapes.

$$\text{Davis} \quad \phi(\zeta) = \max\{0, \min\{1, 2\zeta\}\} \quad (2.111)$$

$$\text{HCUS} \quad \phi(\zeta) = \frac{3}{2} \frac{\zeta + |\zeta|}{\zeta + 3} \quad (2.112)$$

Le limiteur HCUS 2.112, plus dissipatif, présenté à titre d'exemple a été utilisé pour des simulations présentant de très fortes discontinuités (tube à choc argon-air).

2.3.2.2 Lax-Wendroff cell vertex (LWCV)

Dans ce cas les variables sont exprimées aux nœuds du domaine. Ce schéma numérique correspond à la réduction à une dimension du schéma numérique d'AVBP présenté au chapitre 2.2.2.

$$W_j^{n+1} = W_j^n - \Delta t \left(r_j^{conv} + r_j^{visc} - c_j + d_j^{(2)} + d_j^{(4)} \right) \quad (2.113)$$

Où $d_j^{(2)}$ et $d_j^{(4)}$ sont les viscosités artificielles d'ordre 2 et 4. Le résidu issu du flux convectif est calculé à l'aide de l'équation 2.114 où \mathbb{A} est la matrice jacobienne et $\Delta F_{j+\frac{1}{2}}^n = F_{j+1}^n - F_j^n$. Notons que dans Flow1D, la matrice jacobienne est calculée directement alors qu'elle est approchée dans AVBP.

$$r_j^{conv} = \frac{1}{\Delta x} \left[\frac{1}{2} \left(\Delta F_{j+\frac{1}{2}}^n + \Delta F_{j-\frac{1}{2}}^n \right) - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\mathbb{A}_{j+\frac{1}{2}}^n \Delta F_{j+\frac{1}{2}}^n - \mathbb{A}_{j-\frac{1}{2}}^n \Delta F_{j-\frac{1}{2}}^n \right) \right] \quad (2.114)$$

Le résidu visqueux est calculé avec 3 points (2.115)

$$r_j^{visc} = \frac{1}{\Delta x} \left[F_v \left(W_{j+\frac{1}{2}}^n, \nabla W_{j+\frac{1}{2}}^n \right) - F_v \left(W_{j-\frac{1}{2}}^n, \nabla W_{j-\frac{1}{2}}^n \right) \right] \quad (2.115)$$

$$\nabla W_{j+\frac{1}{2}} = \frac{W_{j+1} - W_j}{\Delta x} \quad (2.116)$$

Le calcul des termes sources se fait par méthode Cell-Vertex centrée.

$$c_j = \frac{C \left(W_{j+\frac{1}{2}}^n \right) + C \left(W_{j-\frac{1}{2}}^n \right)}{2} \quad (2.117)$$

La viscosité artificielle d'ordre 2 est un pseudo-Laplacien modulé par le coefficient $\epsilon^{(2)}$ qui est entré par l'utilisateur.

$$d_j^{(2)} = -\frac{\epsilon^{(2)}}{2\Delta t} \left[D_{j+\frac{1}{2}}^{(2)} - D_{j-\frac{1}{2}}^{(2)} \right] \quad (2.118)$$

$$D_{j\pm\frac{1}{2}}^{(2)} = \zeta_{j\pm\frac{1}{2}} \left(W_{j\pm\frac{1}{2}} - W_j \right) \quad (2.119)$$

La viscosité artificielle d'ordre 4 est un bi-Laplacien. Dans ce cas l'utilisateur configure le coefficient $\epsilon^{(4)}$ qui n'est pas directement utilisé dans le calcul du résidu.

$$d_j^{(4)} = -\frac{1}{2\Delta t} \left[D_{j+\frac{1}{2}}^{(4)} - D_{j-\frac{1}{2}}^{(4)} \right] \quad (2.120)$$

$$D_{j\pm\frac{1}{2}}^{(4)} = \epsilon^{(4*)} \zeta_{j\pm\frac{1}{2}} \left[\frac{\nabla W_{j\pm 1} + \nabla W_j}{2} \left(x_{j\pm\frac{1}{2}} - x_j \right) - \left(W_{j\pm\frac{1}{2}} - W_j \right) \right] \quad (2.121)$$

$$\epsilon^{(4*)} = \max \left(0, \epsilon^{(4)} - \zeta \epsilon^{(2)} \right) \quad (2.122)$$

Où ζ est le senseur qui permet de n'appliquer la viscosité artificielle que dans les zones de forts gradients (cf. §2.2.3). C'est senseur de Jameson [38] qui est utilisé dans Flow1D.

2.3.3 Conditions aux limites

Les conditions aux limites implantées dans Flow1D sont de type NSCBC [42]. Le principe de cette méthode est succinctement décrit dans cette section. On commence par considérer les variables caractéristiques dérivées par Thompson [66] :

$$\mathcal{L}_1 = (u - a) \left(\frac{\partial p}{\partial x} - \rho a \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.123)$$

$$\mathcal{L}_2 = u \left(a^2 \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\partial p}{\partial x} \right) \quad (2.124)$$

$$\mathcal{L}_3 = (u + a) \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \rho a \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2.125)$$

Ces variables caractérisent les amplitudes des ondes se propageant dans le domaine. Lorsque l'on se place à un bord du domaine de calcul, certaines ondes sont sortantes et l'on peut calculer la valeur des variables à partir de l'intérieur du domaine. Ici les dérivés sont calculées par différences finies décentrées d'ordre 1 ou 2. Mais dans le cas des ondes entrantes, les variables caractéristiques dépendent de l'extérieur du domaine et l'on ne peut pas les calculer directement. Le principe de la méthode NSCBC est d'exprimer les ondes entrantes en fonction des ondes sortantes. Cette relation découle de la condition aux limites que l'on cherche à imposer. Avec les équations

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_3) = 0 \quad (2.126)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \frac{T}{\rho a^2} \left[-\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2}(\gamma - 1)(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_3) \right] = 0 \quad (2.127)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{a^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_3) \right] = 0 \quad (2.128)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2\rho a^2}(\mathcal{L}_3 - \mathcal{L}_1) = 0 \quad (2.129)$$

On peut déterminer l'expression qui relie les ondes entrantes et sortantes. Par exemple, imposer une pression et température constante soit $\frac{\partial p}{\partial t} = 0$ et $\frac{\partial T}{\partial t} = 0$ permet avec 2.126 et 2.127 de calculer toutes les variables caractéristiques. On calcule ensuite l'évolution des variables conservatives au pas de temps suivant avec :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -d_1 \quad (2.130)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} = -u d_1 - \rho d_3 \quad (2.131)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} = -\frac{1}{2}u^2 d_1 - \frac{d_2}{\gamma - 1} - \rho u d_3 \quad (2.132)$$

où

$$d_1 = \frac{1}{a^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right]$$

$$d_2 = \frac{1}{2}(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1)$$

$$d_3 = \frac{1}{2\rho a}(\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1)$$

D'un point de vue acoustique, ces conditions aux limites sont parfaitement réfléchissantes ce qui peut poser problème dans certaines simulations. Il est aussi possible de créer des conditions aux limites partiellement réfléchives en écrivant, toujours pour imposer une pression p_{cible} constante

$$\begin{cases} \mathcal{L}_1 = K(p - p_{\text{cible}}) & \text{si } \mathcal{L}_1 \text{ est sortant} \\ \mathcal{L}_3 = K(p - p_{\text{cible}}) & \text{si } \mathcal{L}_3 \text{ est sortant} \end{cases} \quad (2.133)$$

Dans ce cas plus le coefficient de relaxation K est faible moins la condition limite est réfléchissante. En contrepartie le signal imposé est déphasé et la pression peut s'en écarter. Notons qu'il existe une version améliorée qui impose une pression cible tout en étant non-réfléchissante [67].

2.4 Validations du code Flow1D

L'objectif de cette section est de valider le code Flow1d qui a été écrit dans le cadre de cette thèse et présenté dans le chapitre 2.3. Les deux schémas numériques ainsi que les conditions aux limites et les modèles développés pour la simulation 1D de systèmes moteurs sont validés afin d'être utilisés dans la suite de ces travaux. Les premières validations sont effectuées sur un tube à choc de Sod [68] dont la solution analytique est donnée par un solveur de Riemann exact [69]. Les résultats des simulations sont comparés aux résultats analytiques et aux résultats d'un code commercial. Représenté sur la figure 2.5, le tube à choc est un test classique de schéma numérique, il permet aussi de tester les méthodes de stabilisation des schémas dans des conditions difficiles (discontinuités importantes). Dans ce cas les conditions aux limites n'entrent pas en compte car on regarde le résultat après un temps très court, avant que les discontinuités n'atteignent les limites du domaine. Le deuxième cas test est une tuyère convergente divergente, aussi appelée tuyère de Laval, schématisée sur la figure 2.7. Ce cas stationnaire permet de valider les conditions aux limites de pression en entrée et sortie et la prise en compte des termes sources, en particulier le terme de variation de section.

2.4.1 Tube à choc

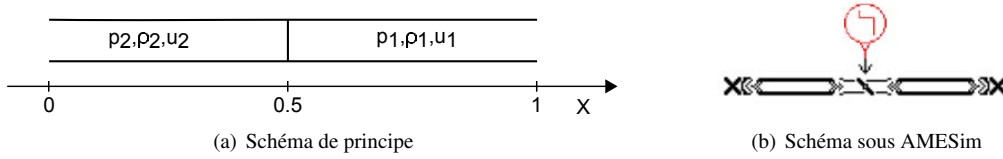


FIGURE 2.5 – Tube à choc de Sod

Le tube à choc 2.5 est un tube de section constante coupé en deux zones distinctes par un diaphragme à $x = 0.5$ où x est l'abscisse adimensionnée par la longueur du tube L . Les pressions et masses volumiques sont adimensionnées par les valeurs initiales dans l'état 2 et la vitesse par $\sqrt{p_2/\rho_2}$. On utilise le temps adimensionné

$$\tau = t \frac{\sqrt{p_2/\rho_2}}{L}$$

Les valeurs à l'état initial sont données dans la table 2.2, la pression est plus élevée à gauche qu'à droite du diaphragme et le tube est à l'équilibre thermique. À l'instant $\tau = 0$ sec le diaphragme rompt, une onde de choc et une discontinuité de contact se propagent dans la zone basse pression tandis qu'un faisceau d'ondes de détente se propage dans la zone haute pression. La figure 2.6 montre les résultats à $\tau = 0.7$ des calculs de Flow1D avec les deux schémas numériques sur le tube à choc comparés à la solution analytique et aux résultats du code commercial AMESim. Les résultats du code Flow1D concordent avec la solution analytique et les résultats du code commercial. L'absence d'oscillations parasites (wiggles en anglais) témoigne du bon comportement des limiteurs de flux et viscosités artificielles.

Gauche			Droite			Numérique	
p_2	ρ_2	u_2	p_1	ρ_1	u_1	N	CFL
1	1	0	0.1	0.1	0	3000	0.7

TABLE 2.2 – Paramètres des calculs du tube à choc.

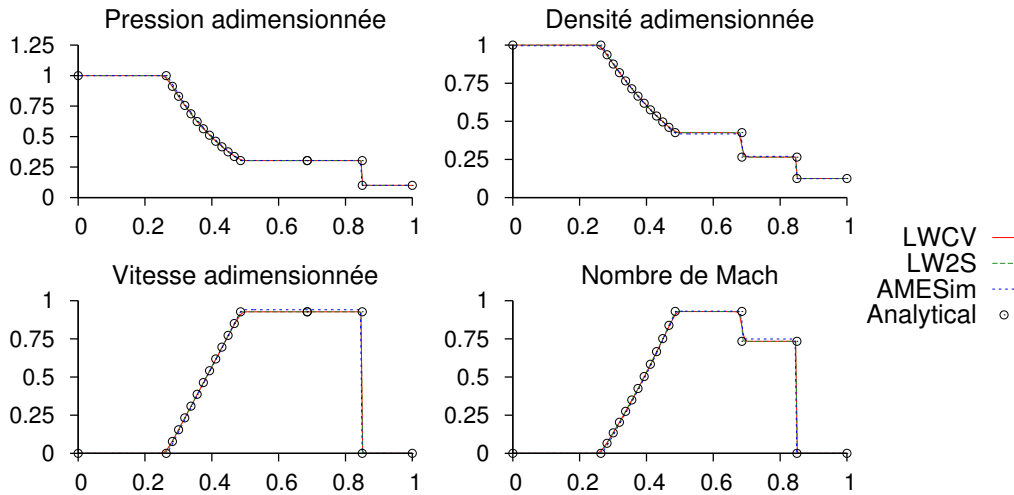


FIGURE 2.6 – Validation de FlowID sur le tube à choc.

2.4.2 Tuyère de Laval

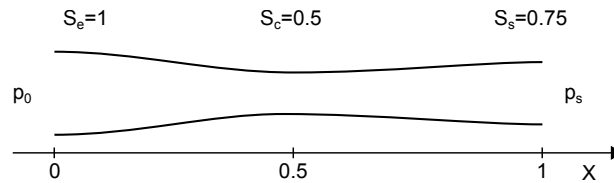


FIGURE 2.7 – Schéma de la tuyère

La tuyère de la figure 2.7 a un profil en cosinus et est composée d'un réservoir à pression constant p_0 qui débite de l'air vers la sortie à pression p_s . On effectue la validation pour trois pressions de sortie, résumées sur la table 2.3. Les trois pressions de sortie correspondent à trois régimes d'écoulement de la tuyère particuliers. Les pressions et nombre de Mach le long de la tuyère sont présentés sur la figure 2.8 où les pressions sont adimensionnées par p_0 . Dans le premier régime, lorsque la pression de sortie est proche de la pression d'entrée, l'écoulement est subsonique dans toute la tuyère. Dans les deux autres régimes la vitesse est sonique au col de la tuyère, on dit qu'elle est amorcée, le débit massique est maximum. Dans l'un des cas un choc est présent dans le divergent alors qu'une pression de sortie plus basse repousse le choc hors de

la tuyère. Comme pour le tube à choc les résultats sont en accord avec la solution analytique et démontrent la capacité du code Flow1D et ses conditions aux limites en pression à simuler des écoulements compressibles non visqueux de gaz parfaits.

Entrée		Sortie		Numérique	
p_0	T_0	p_s	T_s	N	CFL
10^5	300	1.6×10^4	300	500	0.7
10^5	300	7.5×10^4	300	500	0.7
10^5	300	8.9×10^4	300	500	0.7

TABLE 2.3 – Paramètres des calculs de la tuyère

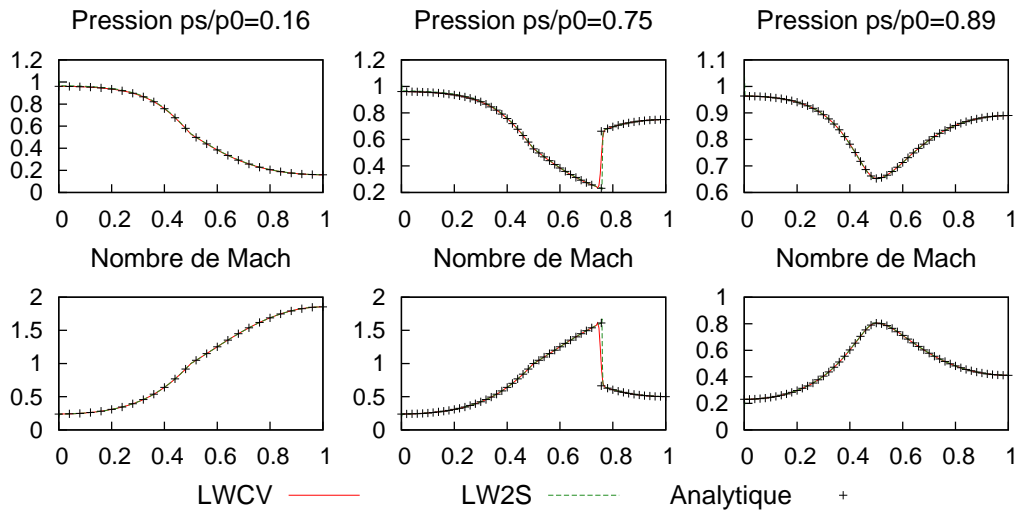


FIGURE 2.8 – Validation de Flow1D sur la tuyère convergente divergente.

2.4.3 Écoulements pulsés

Pour ce cas on cherche à se rapprocher des écoulements existant dans les lignes d'admission et d'échappement d'un système moteur afin de valider les modèles en situation. Pour un moteur en rotation à 1200 tr/min, un cycle dure 0.1 sec, pendant ce laps de temps la soupape s'ouvre et le mouvement du piston pousse (échappement) ou aspire (admission) de l'air dans la tubulure puis se ferme. On modélise ce phénomène de manière simple en imposant la pression atmosphérique d'un côté d'un tube de longueur L et de l'autre, le débit massique :

$$\rho u = A \exp \left[\frac{(\text{mod}(t, 0.1) - t_0)^2}{\sigma^2} \right] \quad (2.134)$$

avec la fonction modulo est définie par $\text{mod}(a, b) = a - bE\left(\frac{a}{b}\right)$ où E est la fonction partie entière. Ce débit massique est représenté sur la figure 2.9 et les paramètres de calcul résumé

dans le tableau 2.4. Le débit massique imposé correspond au débit massique que l'on a dans le

A ($\text{kg}\cdot\text{s}^{-1}\cdot\text{m}^{-2}$)	σ (sec)	t_0 (sec)	L (m)	N	CFL
-39.79	3.82×10^{-3}	1×10^{-2}	0.757	757	0.7

TABLE 2.4 – Paramètres des calculs d'écoulements pulsés

moteur SGEmac du chapitre 4. Ce signal est imposé de manière cyclique avec un cycle de 0.1

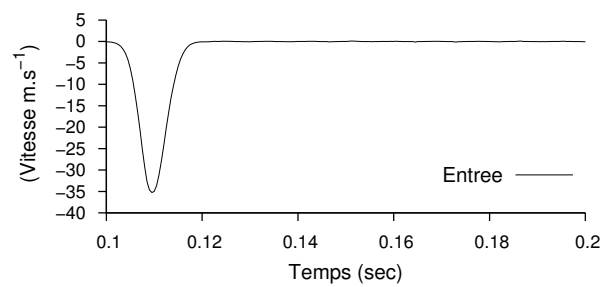


FIGURE 2.9 – Débit massique imposé pour les écoulements pulsés

sec. Comme il n'existe pas de solution analytique à ce problème, les résultats sont comparés à ceux du code commercial AMESim utilisant la librairie 1D CFD1D. La pression au centre de la tubulure est présentée sur la figure 2.10. Les résultats sont très proches, ce qui est logique car les deux codes utilisent les mêmes modèles mathématiques et seules les méthodes numériques diffèrent. Ce test permet principalement de vérifier le bon comportement des conditions aux

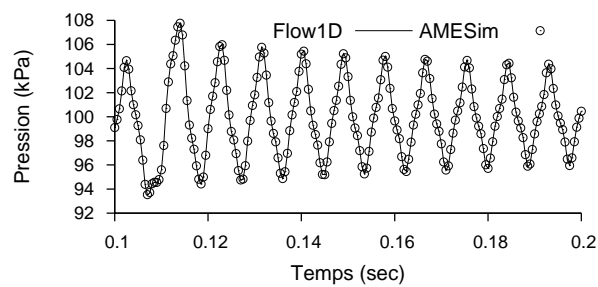


FIGURE 2.10 – Pression au centre du tube

limites en pression et température qui fonctionnent alternativement en entrée et sortie. Le code Flow1D peut donc simuler les lignes d'échappement et d'admission d'un système moteur.

2.5 Modèles pour la simulation de système moteur 1D

Cette section présente les modèles du code Flow1D qui ont été développés pour la simulation de systèmes moteurs de plus en plus complexes. C'est là un des intérêts principaux des couplages 1D-3D car la plupart du temps les modèles 1D sont plus simples à mettre en place que leurs équivalents 3D. Dans certains cas la simulation 3D s'avère même impossible.

2.5.1 Modèles de jonction

Avec le modèle de tubulure quasi 1D utilisé, il est intéressant de pouvoir simuler tout un réseau. Pour cela il est nécessaire de modéliser les jonctions entre tube tels les collecteurs présents dans les lignes d'admission et d'échappement. Le modèle utilisé est basé sur la méthode des caractéristiques, dérivé par [70], c'est un modèle à pression constante (pas de pertes de pression à la jonction). On écrit la variable caractéristique entrante L_3^q pour chaque tube q de section F_q connecté à la jonction de N tubes

$$\mathcal{L}_3^q = K_T - \mathcal{L}_1^q \quad (2.135)$$

$$K_T = \frac{N}{F_T} \sum_q F_q \mathcal{L}_1^q \quad (2.136)$$

$$F_T = \sum_q F_q \quad (2.137)$$

En considérant le cas dégénéré d'une jonction de 2 tubes on a

$$\mathcal{L}_3^1 = \frac{F_1 - F_2}{F_1 + F_2} \mathcal{L}_1^1 + \frac{2F_2}{F_1 + F_2} \mathcal{L}_1^2 \quad (2.138)$$

Si $F_2 = 0$ on retrouve bien une condition limite de paroi réfléchissante. Lorsque $F_2 = F_1$ l'onde entrante dans 1 est l'onde sortante de 2. Pour F_1 et F_2 quelconques on retrouve un modèle de variation de section.

2.5.2 Modélisation des variations de section soudaines

Les équations 2.101 permettent de prendre en compte une section variable mais l'utilisation d'un terme source proportionnel à la pression $p \frac{\partial S}{\partial x}$ déstabilise le schéma numérique. L'approximation numérique de ce terme source $p \frac{\Delta S}{\Delta x}$ doit rester faible. Ce qui signifie que pour une géométrie donnée $S(x)$ il faut un maillage suffisamment petit. Dans le cas où cette variation est instantanée, il est nécessaire d'utiliser un modèle d'élargissement soudain ou de restriction soudaine selon le sens de l'écoulement. Ces modèles sont aussi utilisés lorsque la variation de section est trop brusque pour le maillage donné. Pour un élargissement de l'état 1 vers l'état 2 présenté sur le schéma 2.11,

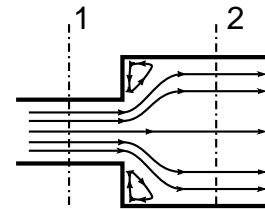


FIGURE 2.11 – Schéma d'un élargissement soudain

en considérant un état quasi-stationnaire et un écoulement subsonique, on écrit

$$\gamma \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{\gamma - 1}{2} u_1^2 = \gamma \frac{p_2}{\rho_2} + \frac{\gamma - 1}{2} u_2^2 \quad (2.139)$$

$$-\rho_2 u_2 S_2 = \rho_1 u_1 S_1 \quad (2.140)$$

$$(p_2 - p_1) S_2 = \rho_1 u_1^2 S_1 - \rho_2 u_2^2 S_2 \quad (2.141)$$

où les vitesses u_l $l = 1, 2$ sont pondérées par les normales sortantes de leurs tubes respectifs, on a $u_1 u_2 < 0$. En remaniant ces équations de conservation de l'énergie, la masse et la quantité de mouvement on obtient un polynôme d'ordre 2 sur la vitesse u_2 .

$$-\frac{\gamma + 1}{2} \rho_1 u_2^2 - \gamma \left[\rho_1 u_1 + \frac{p_1 S_2}{\rho_1 S_1} \right] u_2 - \left[\gamma p_1 + \frac{\gamma - 1}{2} \rho_1 u_1^2 \right] = 0 \quad (2.142)$$

à partir de la vitesse u_2 on calcule ρ_2 avec 2.140 puis p_2 avec 2.141 ou 2.139. On procède de la même manière pour calculer les valeurs de l'état 1 à partir de celles de l'état 2.

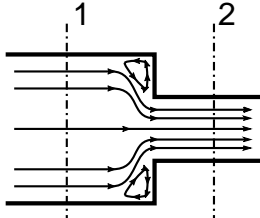


FIGURE 2.12 – Schéma d'une restriction soudaine

Le modèle de restriction est tiré de [71] où on fait l'hypothèse d'un écoulement isentropique quasi-stationnaire. On écrit alors les équations de conservation de la masse, de l'énergie et la relation isentropique entre les états 1 et 2 de la figure 2.12

$$\gamma \frac{p_1}{\rho_1} + \frac{\gamma - 1}{2} u_1^2 = \gamma \frac{p_2}{\rho_2} + \frac{\gamma - 1}{2} u_2^2 \quad (2.143)$$

$$-\rho_2 u_2 S_2 = \rho_1 u_1 S_1 \quad (2.144)$$

$$\frac{a_1}{a_2} = \left(\frac{p_1}{p_2} \right)^{\frac{\gamma - 1}{2\gamma}} \quad (2.145)$$

En combinant ces équations on obtient l'équation sur u_2

$$\frac{\gamma + 1}{2} u_2^2 + a_1^2 \left[u_1 \frac{S_1}{S_2} \right]^{\gamma - 1} u_2^{1 - \gamma} - \left[a_1^2 + \frac{\gamma - 1}{2} u_1^2 \right] = 0 \quad (2.146)$$

Cette équation de la forme générale $f(u_2) = 0$ ne peut pas être résolue de manière analytique. On utilise la méthode itérative de Newton-Raphson pour résoudre 2.146 numériquement. La valeur initiale u_2^0 correspond à la solution dans le cas non compressible, la méthode itérative s'écrit

$$u_2^{n+1} = u_2^n - \frac{f(u_2^n)}{f'(u_2^n)} \quad (2.147)$$

$$u_2^0 = u_1 \frac{S_1}{S_2} \quad (2.148)$$

La convergence est en général très rapide (moins de 5 itérations) mais devient problématique lorsque u_2 est proche de a_2 . Quand $u_2 = a_2$, on dit qu'il y a blocage sonique car le débit en 2 ne peut plus augmenter. Ce modèle doit être utilisé dans des zones peu susceptibles de présenter des blocages soniques. Comme les équations 2.139, 2.140 et 2.145 sont parfaitement symétriques par rapport à l'indice, la méthode de résolution ainsi créée permet aussi de calculer l'état 1 à partir de l'état 2.

Validation

Les validations des modèles de variations de section soudaines se font sur le cas test de l'écoulement pulsé présenté dans la section 2.4.3 dont les paramètres sont résumés sur le tableau 2.5. Le rayon du tube s'élargi d'un facteur $\frac{r}{r_0}$ à une distance d de la condition aux limites pulsée. Contrairement à un écoulement stationnaire unidirectionnel, cela permet de tester en même temps

A (kg/s/m ²)	σ (sec)	t_0 (sec)	L (m)	d (m)	$\frac{r}{r_0}$	N	CFL
-39.79	3.82×10^{-3}	1×10^{-2}	0.757	0.5	2	757	0.7

TABLE 2.5 – Paramètres des calculs d'écoulements pulsés

les modèles de restriction et d'élargissement. L'évolution de la pression au centre du tube est présentée sur la figure 2.13. Le modèle B correspond à l'association des modèles de restriction et d'élargissement présentés dans cette section et le modèle A est l'association du modèle d'élargissement avec le modèle de restriction présenté à la section 2.5.3. Le modèle B donne les mêmes

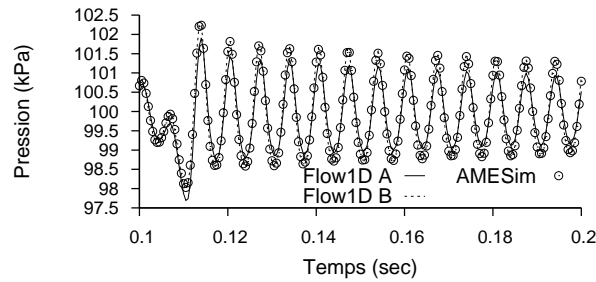


FIGURE 2.13 – Pression au centre du tube

résultats que le code commercial, en effet ils utilisent les mêmes hypothèses. Le modèle A présente un amortissement plus important conformément aux résultats obtenus dans [72]. Ainsi ces deux modèles de variation de section soudaine sont validés sur les écoulements dans lesquels ils vont être utilisés.

2.5.3 Modèle de papillon d'admission

Un papillon est une vanne généralement utilisée dans la ligne d'admission d'un moteur pour réguler le débit d'air entrant. Il se compose d'un disque sur un axe de rotation dans un tube cylindrique représenté sur la figure 2.14. En position ouverte le papillon entraîne une faible perte de charge. Cette chute de pression augmente quand le papillon se ferme jusqu'à atteindre le blocage sonique puis la fermeture totale. On le modélise généralement par une restriction suivie d'un élargissement soudain de section et on peut utiliser les modèles présentés au chapitre 2.5.1. Il faut dans un premier temps calculer la section de passage en fonction de la position du papillon.

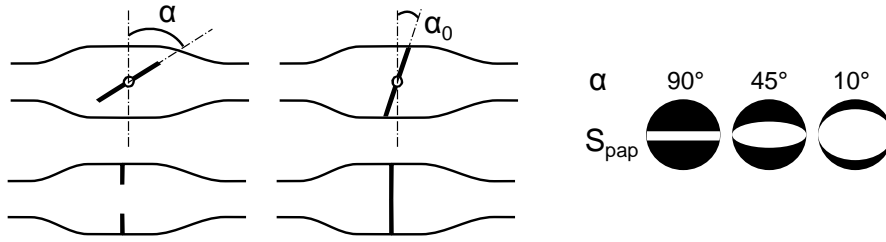


FIGURE 2.14 – Schéma d'un papillon pour deux angles d'ouverture α , de sa modélisation 0D et de l'aire de passage S_{pap}

En négligeant l'axe de rotation et l'épaisseur de la plaque on a

$$S_{\text{pap}}(\alpha) = S \left[1 - \frac{\cos \alpha}{\cos \alpha_0} \right] \quad (2.149)$$

La formule prenant en compte le diamètre de l'axe de rotation b est bien plus complexe

$$S_{\text{pap}}(\alpha) = S \left[\left(1 - \frac{\cos \alpha}{\cos \alpha_0} \right) + \frac{2}{\pi} \left[\frac{b}{\cos \alpha} (\cos^2 \alpha - b^2 \cos^2 \alpha_0)^{\frac{1}{2}} + \frac{\cos \alpha}{\cos \alpha_0} \sin^{-1} \left(\frac{b \cos \alpha_0}{\cos \alpha} \right) - b(1 - b^2)^{\frac{1}{2}} - \sin^{-1} b \right] \right] \quad (2.150)$$

L'épaisseur de la plaque t peut être prise en compte en utilisant α_{eff} dans 2.150

$$\alpha_{\text{eff}} = \alpha - \arctan \left(\frac{1}{\frac{D}{t} \cos \alpha_0 - \tan \alpha_0} \right) \quad (2.151)$$

Pour les faibles angles d'ouverture il est nécessaire de prendre en compte une aire de fuite qui s'ajoute à la section de passage théorique du papillon. Cette aire de fuite décroît avec l'ouverture du papillon, dans [73] l'aire de fuite vaut encore 15% de la section de passage du papillon à 4° d'ouverture. Une fois la section de passage calculée le modèle de papillon est l'enchaînement d'un modèle de restriction et d'un modèle d'élargissement.

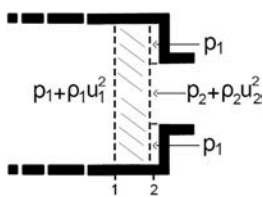


FIGURE 2.15 –

Distribution de pression pour la conservation du moment

Dans les cas où la restriction de section peut générer un blocage sonore il est préférable d'utiliser une méthode qui ne présente pas de problème de convergence dans ces domaines. On utilise alors un modèle de restriction soudaine basé sur la conservation de quantité de mouvement développé dans [72] pour des applications dans des cas non isentropiques. La conservation du moment sur le volume de contrôle présenté sur la figure 2.15 implique

$$\begin{aligned} \rho_2 u_2^2 S_2 - \rho_1 u_1^2 S_1 &= p_1 S_1 - [p_2 S_2 + p_2 (S_1 - S_2)] \\ \rho_2 u_2^2 S_2 - \rho_1 u_1^2 S_1 &= (p_2 - p_1) S_1 \end{aligned} \quad (2.152)$$

Avec les équations de conservation de la masse 2.140 et de l'énergie 2.139 on obtient un poly-

nôme d'ordre 2 en U_2

$$-\frac{\gamma+1}{2}U_1U_2^2 + \left[\frac{S_2}{S_1} + \left(\gamma - \frac{\gamma-1}{2} \frac{S_2}{S_1} \right) U_1^2 \right] U_2 - U_1 = 0 \quad (2.153)$$

où U et A sont adimensionnés par $a_{\text{tot}} = a^2 + \frac{\gamma-1}{2}u^2$.

Validation

Comme le modèle précédent, celui-ci est validé sur le cas test de l'écoulement pulsé avec les résultats du code commercial AMESim comme référence. Dans un tube de longueur L , le papillon est situé à une distance d de la condition aux limites pulsée et a un angle d'ouverture α . Les paramètres du calculs sont résumés dans le tableau 2.6. Sur la figure 2.16 les résultats de Flow1D

A (kg/s/m ²)	σ (sec)	t_0 (sec)	L (m)	d (m)	α (°)	N	CFL
-39.79	3.82×10^{-3}	1×10^{-2}	0.757	0.5	45	757	0.7

TABLE 2.6 – Paramètres des calculs d'écoulements pulsés

sont en accord avec ceux de AMESim. L'utilisation du second modèle de restriction engendre un

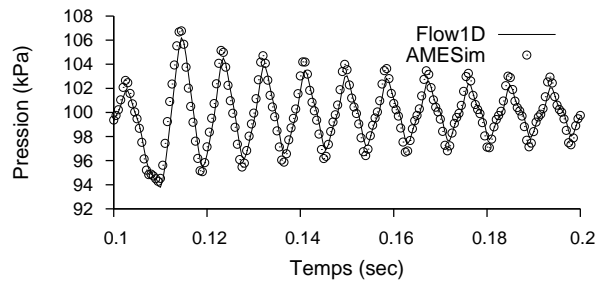


FIGURE 2.16 – Pression au centre du tube pour un papillon à 60°

amortissement plus important que celui du code commercial mais permet d'éviter les problèmes de convergence à l'approche d'un écoulement sonique. On remarque un léger déphasage entre les deux calculs dont l'origine reste inexpliquée. Néanmoins ces résultats permettent de valider le modèle de papillon qui sera utilisé dans le chapitre 5.

2.5.4 Arrête flamme

Un arrête flamme est un équipement de sécurité qui permet d'éteindre la flamme et d'empêcher sa propagation dans une conduite de gaz. Il est généralement composé d'une région de diamètre plus important que le tube qu'il protège dans laquelle on trouve une grille qui permet d'éteindre la flamme. L'implémentation du modèle est basée sur les travaux de [74]. La perte de pression

induite par l'arrêt flamme s'écrit

$$\Delta p = \frac{1}{2C_D^2} \rho U^2 + \rho l' \frac{\partial U}{\partial t} \quad (2.154)$$

où le coefficient de décharge C_D est donné par le constructeur en fonction du débit volumique. La longueur caractéristique $l' = \frac{\pi d}{4} + h$ est déterminée de façon à concorder avec le modèle de Howe [75]. $d = 0.5mm$ est le diamètre des trous de la grille et $h = 20mm$ son épaisseur. La dépendance temporelle introduite permet de reproduire les propriétés acoustiques des trous.

2.6 Conclusion

Le code Flow1D a été développé et validé avec deux schémas numériques : LW2S et LWCV. Les validations ont été effectuées par comparaison à des solutions analytiques sur les cas tests de la tuyère de Laval et le tube à choc. Dans le cas des écoulements pulsés, les résultats de Flow1D ont été comparés aux résultats d'un code commercial. L'absence d'oscillations montre que les méthodes de stabilisation par limiteur de flux et viscosité artificielle sont bien implémentées dans Flow1D. La condition aux limites faisant à la fois entrée et sortie en pression a aussi été validée par le test sur la tuyère de Laval et les écoulements pulsés. Les modèles de variation de section soudaine, de papillon et d'arrêt flamme ainsi que leur implémentation dans Flow1D sont validés sur le cas des écoulements pulsés.