

Thèse

présentée par

Guillaume Lodier

pour l'obtention du grade de

Docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Rouen

Discipline : Energétique

Spécialité : Mécanique des Fluides

Formation doctorale : Sciences Physiques, Mathématiques
et de l'Information pour l'Ingénieur

Laboratoire d'accueil : UMR-CNRS-6614-CORIA

Analyse de l'initiation et du développement de l'auto-inflammation après compression rapide d'un mélange turbulent réactif Application au contexte CAI/HCCI

Membres du jury :

Rapporteurs :

Bénédicte Cuenot Chercheur Senior, CERFACS, Toulouse
Dirk Roekaerts Professeur, Delft University of Technology

Examineurs :

Olivier Colin Ingénieur de Recherche, CNRS, IFP Energie nouvelles
Philippe Guibert Professeur, UPMC-CNRS, Institut Jean Le Rond d'Alembert

Membre invité :

Frédéric Ravet Ingénieur Expert, Renault Lardy

Directeurs de thèse :

Pascale Domingo Directeur de Recherche, CNRS, CORIA
Luc Vervisch Professeur, INSA de Rouen, CORIA

Remerciements

Tout d'abord, j'adresse mes sincères remerciements aux membres du jury, Mme Bénédicte Cuénot, et MM. Dirk Roekaerts, Olivier Colin et Philippe Guibert pour l'intérêt qu'ils ont porté à ces travaux.

Je tiens à remercier tout particulièrement mes encadrants, Pascale Domingo et Luc Vervisch. Leur confiance a été pour moi un atout essentiel pour mener à bien les travaux présentés dans ce manuscrit. Merci également à Frédéric Ravet d'avoir su identifier les problématiques industrielles clés et définir le sujet de cette étude qui m'a passionnée durant ces trois dernières années. J'espère avoir contribué, à mon niveau, à apporter des éléments de compréhension au problème de l'auto-inflammation en charge homogène.

Merci à Vincent Moureau, Ghislain Lartigue et Guillaume Ribert pour le temps qu'ils m'ont accordé. Tous ces échanges ont été réellement enrichissants et ont contribué à mon épanouissement scientifique durant ces trois années.

Merci à tous les copains, au labo et/ou à l'extérieur ! Pas de liste exhaustive ici, personnes et souvenirs étant trop nombreux, je risquerais d'en oublier (n'y voyez pas là une pirouette qui me permettrait de contourner un exercice difficile, bien sûr ...). Franchement, on aura bien rigoler. Ces trois années n'auraient pas eu cette saveur sans vous. Amis, trouvez ici l'expression de ma plus profonde gratitude. Bon vent à vous !

Merci enfin à ma famille, pour sa bienveillance et tout le soutien qu'elle m'a témoigné.

à ma très chère Julie ...

Résumé

Analyse de l'initiation et du développement de l'auto-inflammation après compression rapide d'un mélange turbulent réactif - Application au contexte CAI/HCCI

La stratégie de combustion par auto-inflammation d'une charge homogène en composition (CAI quand le combustible est l'essence et HCCI, lorsqu'il s'agit de Diesel) s'intègre dans une démarche de réduction des émissions de particules et de NO_x, tout en conservant les rendements thermiques élevés des moteurs Diesel classiques. Dans ces derniers, l'auto-allumage est initié au moment de l'injection de combustible dans le cylindre, alors que dans les moteurs essence, c'est une étincelle générée par la bougie qui initie la combustion. L'auto-inflammation en charge homogène nécessite d'imaginer d'autres leviers de contrôle de la combustion dans le temps. Dans cette optique, une compréhension fine des mécanismes de couplage entre l'aérodynamique et la thermochimie est nécessaire.

Les Machines à Compression Rapide (MCR) sont des dispositifs expérimentaux permettant de reproduire une phase de compression dans un moteur CAI/HCCI, en s'extrayant des difficultés inhérentes à l'environnement moteur. Durant cette thèse, des simulations numériques directes (DNS) d'un écoulement turbulent réactif dans une MCR ont été effectuées, afin d'analyser les mécanismes physiques fondamentaux contrôlant l'initiation et le développement de l'auto-inflammation CAI/HCCI. Deux régimes ont ainsi pu être définis. Le premier, dit quasi-homogène, est caractérisé par une auto-inflammation en masse d'un volume important du mélange réactif et s'accompagne de fortes ondes de pression potentiellement dangereuses pour l'intégrité du moteur. Dans le second régime, dit localisé, les noyaux s'initient de manière plus sporadique dans l'espace et dans le temps ; leur topologie est telle qu'aucune onde de pression significative n'est générée lors de l'auto-allumage. Pour délimiter ces deux comportements, un diagramme des régimes d'auto-inflammation est finalement proposé.

Abstract

Analysis of the initiation and development of autoignition after a rapid compression of a turbulent reactive mixture - Application to the context of CAI/HCCI

Combustion by autoignition of a homogeneous charge (called CAI when the fuel is gasoline, or HCCI, when in the case of diesel) aims at reducing particulate matter as well as NO_x emissions, while maintaining higher thermal efficiency of conventional diesel engines. In the latter, autoignition is initiated at the time when fuel is injected into the cylinder, while in gasoline engines, combustion starts when a spark is provided. In the case of the CAI/HCCI like combustion, another strategy to control the combustion timing must be imagined, which requires a fine understanding of the mechanisms of coupling between aerodynamics and thermochemistry.

Rapid Compression Machines (RCM) are experimental devices designed to reproduce a CAI/HCCI compression stroke, circumventing the difficulties encountered for measurements arising in real engine environment. In this thesis, Direct Numerical Simulations (DNS) of a turbulent reactive flow have been performed, in order to analyse the fundamental physical mechanisms controlling the initiation and the development of autoignition in CAI/HCCI engine. This study led to identification of two regimes. The first, known as quasi-homogeneous, is characterized by volumetric autoignition of large zones of the reactive mixture and results in the generation of strong pressure waves, which are potentially dangerous for the structure of engines. In the second regime, called localized, hot spots are initiated more sporadically in space and time, and their topology is such that no significant pressure wave is generated. To delineate these two limiting behaviors, an autoignition diagram is finally proposed.

Table des matières

1	Introduction générale	15
1.1	Contexte environnemental	15
1.2	Généralités sur les moteurs à combustion interne	16
1.3	Vers l'auto-inflammation homogène	19
1.4	Objectifs de la thèse et plan du manuscrit	21
2	Physique de l'auto-allumage	23
2.1	Introduction	23
2.2	Revue générale	24
2.2.1	Les différentes phases de l'auto-inflammation	24
2.2.2	Analyse théorique	24
2.2.3	Simulations numériques directes	26
2.2.3.1	Principes	26
2.2.3.2	A la lumière de la théorie de Zel'dovich	27
2.2.3.3	Approches alternatives	29
2.3	L'auto-inflammation dans un milieu homogène en composition	36
2.3.1	Introduction	36
2.3.2	Etude expérimentale	38
2.3.2.1	Sur moteurs	38
2.3.2.2	Les machines à compression rapide	40
2.3.3	Etudes numériques et modélisation	42
2.3.3.1	Approches spécifiques : les modèles multi-zones	42
2.3.3.2	Limites de l'approche par zones et améliorations	46
2.3.3.3	Approches plus générales	47
2.4	Conclusions	48
3	Outils de simulation	51
3.1	Introduction	51
3.2	Equations générales de la mécanique des fluides et de la thermochimie	53
3.2.1	Description de l'état du système en combustion turbulente	53
3.2.1.1	Description de la composition du mélange	53
3.2.1.2	Description des phénomènes thermochimiques	54
3.2.1.3	Outils théoriques de description de la cinétique chimique	56
3.2.2	Équations générales de l'aérothermochimie	56
3.2.2.1	Équation de continuité	56

3.2.2.2	Équation de Navier-Stokes	57
3.2.2.3	Conservation de l'énergie totale non chimique	57
3.2.2.4	Conservation des scalaires passifs/réactifs	58
3.2.3	Grandeurs caractéristiques de la combustion turbulente	59
3.2.3.1	La turbulence homogène et isotrope	59
3.2.3.2	Nombres adimensionnels du transport moléculaire	62
3.2.3.3	Caractérisation des interactions combustion/turbulence	63
3.3	Description du code SiTCom	64
3.3.1	Méthodes numériques mises en oeuvre dans SiTCom	64
3.3.1.1	Formulation de type volume fini	64
3.3.1.2	Discrétisation spatiale et intégration temporelle	65
3.3.1.3	Critères de stabilité numérique	65
3.3.2	Conditions aux limites	67
3.3.2.1	Formalisme NSCBC	67
3.3.2.2	Génération d'un bruit turbulent corrélé en entrée	67
4	La tabulation de la thermochimie	69
4.1	Introduction	69
4.2	Problème de la complexité chimique	70
4.2.1	Présentation du problème	70
4.2.2	Réduction des schéma cinétiques	71
4.2.3	Réduction de la complexité des systèmes dynamiques	72
4.2.3.1	Principes	72
4.2.3.2	Validité et perspectives	73
4.3	De la théorie des flammelettes à la tabulation de la chimie	73
4.3.1	Théorie des flammelettes et diagramme de Borghi	73
4.3.2	L'hypothèse des réacteurs homogènes et diagramme des régimes	75
4.4	La tabulation de la thermochimie	76
4.4.1	Présentation du problème de la tabulation	76
4.4.2	Espace des phases réduit	77
4.4.2.1	Introduction : construction naïve	78
4.4.2.2	Fraction de mélange	78
4.4.2.3	Variable d'avancement	79
4.4.2.4	Conditions initiales et/ou limites	79
4.4.3	Différentes approches pour définir la variable d'avancement	80
4.4.4	Archétypes de la combustion laminaire et espace des phases	82
4.4.4.1	Les flammes de prémélange plane, stationnaires et non-étirées	82
4.4.4.2	Les flammes de diffusion stationnaires/instationnaires	84
4.4.4.3	Les réacteurs homogènes parfaitement agités	86
4.4.4.4	Un modèle mixte : MFM	87
4.4.4.5	Remarques sur les espaces des phases réduits	88
4.4.4.6	Vers une résolution <i>in situ</i> des équations des flammelettes	89
4.5	<i>In situ</i> Flamelet generated manifold approach	89
4.5.1	Introduction	89
4.5.2	Reduced phase space canonical-flame solution	91

4.5.2.1	Budget equations	91
4.5.2.2	Numerics, solution procedure and boundary conditions	93
4.5.3	Reduced phase space solution for IFM	95
4.5.3.1	Analysis of differential-diffusion terms	95
4.5.3.2	<i>In situ</i> flamelet-generated manifolds (IFM)	98
4.6	Conclusions	104
5	Description et analyse de l'écoulement dans une MCR	107
5.1	Introduction	107
5.2	Calibration des conditions aux limites d'entrée par LES	109
5.2.1	Modélisation du problème	110
5.2.2	Conditions aux limites NSCBC de type compression isentropique	112
5.2.3	Détermination du profil de vitesse d'admission	113
5.2.4	Validation du modèle : LES de l'écoulement inerte	115
5.2.4.1	Du point de vue de la thermodynamique globale	115
5.2.4.2	Du point de vue de l'aérodynamique	116
5.3	Paramètres de la DNS de l'écoulement réactif	120
5.3.1	Modélisation de la chimie	121
5.3.2	Equations de transport utilisées pour le post-traitement des DNS	122
5.3.3	Différents cas étudiés	122
5.4	Analyse des scénarios d'auto-allumage	123
5.4.1	Description phénoménologique	123
5.4.2	Auto-allumage en régime homogène ou fragmenté	128
5.4.3	Analyse de l'auto-inflammation en 2D	131
5.4.3.1	Les cas 2D	131
5.4.3.2	Scénarios d'initiation et de développement de l'auto-inflammation	131
5.4.3.3	Ecarts au comportement des réacteurs homogènes	137
5.4.4	Tests et exploitation <i>a posteriori</i> de la tabulation des réponses de PSR	139
5.4.4.1	Equations d'évolution de l'état thermo-chimique d'un réacteur homogène	139
5.4.4.2	Validité du modèle des réacteurs homogènes	143
5.4.4.3	Remarques sur T_0	145
5.4.4.4	Détermination de l'existence du coeur adiabatique	147
5.4.4.5	Impact de l'instabilité toroïdale de Kelvin-Helmholtz	149
5.4.4.6	Tabulation à volume constant ou à pression constante ?	155
5.4.5	Diagramme des régimes d'auto-inflammation en mode CAI/HCCI	157
5.5	Conclusions	159
6	Conclusion générale	161
6.1	Conclusions	161
6.2	Perspectives	162
A	Vers la DNS de la MCR avec thermo-chimie tabulée	165
A.1	Introduction	165
A.2	Hypothèses de modélisation	166
A.3	Simulation numérique directe de la chambre de combustion durant la phase d'admission	167

A.3.1	Tabulation de la thermodynamique durant la phase de compression	167
A.3.2	Conditions aux limites d'entrée sur le plan d'admission	171
A.3.2.1	Conditions aux limites NSCBC pour une entrée, avec c_p et c_v variables	171
A.3.3	Test numérique de la méthode NSCBC-3D couplée à la tabulation de la thermo- dynamique, en 2D	181
A.3.3.1	Modélisation de la température de compression non-isentropique	182
A.4	Perspectives : tabulation de la thermochimie durant la phase de combustion à volume constant	185
A.4.1	Implantation des tables thermochimiques de réacteurs homogènes	186
A.4.1.1	Raccord entre les tables en inerte et les tables en réactif	186
A.4.1.2	Détermination des conditions thermodynamiques des gaz frais (P_0, T_0)	187
A.4.1.3	Détermination de la valeur de $\dot{\omega}_{Y_c}$ pour $c = 0$	189
	Liste des figures	191
	Liste des tableaux	197
	Bibliographie	199

Nomenclature

Lettres romaines

Symbole	Signification	Unité
A_{ij}	Déviateur du tenseur des déformations	s^{-1}
c	Variable de progrès normalisée	—
c_p	Capacité calorifique massique du mélange à pression constante	$J.K^{-1}.kg^{-1}$
c_{pk}	Capacité calorifique massique de l'espèce k à pression constante	$J.K^{-1}.kg^{-1}$
c_v	Capacité calorifique massique du mélange à volume constant	$J.K^{-1}.kg^{-1}$
c_{vk}	Capacité calorifique massique de l'espèce k à volume constant	$J.K^{-1}.kg^{-1}$
D_ϕ	Coefficient de diffusion moléculaire associé à ϕ	$m^2.s^{-1}$
e_k	Energie interne massique de l'espèce k	$J.kg^{-1}$
e_s	Energie sensible massique de mélange	$J.kg^{-1}$
e_{sk}	Energie sensible massique de l'espèce k	$J.kg^{-1}$
e_c	Energie cinétique massique	$J.kg^{-1}$
h	Coefficient de convection	$W.m^{-2}.K^{-1}$
k	Energie cinétique turbulente	$m^2.s^{-2}$
l_k	Longueur de Kolmogorov	m
l_λ	Longueur de Taylor	m
l_t	Longueur intégrale	m
N_r	Nombre de réactions élémentaires dans le schéma cinétique considéré	—
N_{sp}	Nombre d'espèces chimiques dans le mélange gazeux	—
P	Pression	Pa
\mathcal{R}	Constante universelle des gaz parfaits	$J.mol^{-1}.K^{-1}$
S_L	Vitesse de flamme étiré	$m.s^{-1}$
S_L^0	Vitesse de flamme laminaire, stationnaire et non-étiré	$m.s^{-1}$
T	Température	K
t	Temps	s
t_{TDC}	Instant du point mort haut	s
\mathcal{U}	Vecteur des variables primitives	
\mathcal{U}	Vecteur des variables conservatives	
\mathbf{u}	Vecteur vitesse	$m.s^{-1}$
u'	Fluctuation moyenne de la vitesse	$m.s^{-1}$
\bar{u}_i	Composante de la partie moyenne de la vitesse dans la $i^{\text{ème}}$ direction	$m.s^{-1}$
u_i	$i^{\text{ème}}$ composante du vecteur vitesse	$m.s^{-1}$
u'_i	Composante de la partie fluctuante de la vitesse dans la $i^{\text{ème}}$ direction	$m.s^{-1}$
u_k	Vitesse associée à l'échelle de Kolmogorov	$m.s^{-1}$

u_{sp}	Vitesse de propagation spontanée de l'onde d'auto-inflammation	$m.s^{-1}$
\mathbf{x}	Vecteur position	m
\bar{W}	Masse molaire moyenne du mélange	$kg.mol^{-1}$
W_k	Masse molaire de l'espèce k	$kg.mol^{-1}$
X_k	Fraction molaire de l'espèce k	—
x_i	$i^{\text{ème}}$ composante du vecteur position	m
Y_c	Variable de progrès	—
Y_k	Fraction massique de l'espèce k	—
Z	Fraction de mélange	—
Z	Scalaire passif	—

Lettres grecques

Symbole	Signification	Unité
δ_f	Epaisseur caractéristique du front de flamme	m
Δ_i	Longueur de la maille dans la $i^{\text{ème}}$ direction	m
δ_r	Epaisseur de la zone de réaction du front de flamme	m
δ_{th}	Epaisseur de la zone de préchauffage du front de flamme	m
ϵ	Dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente	$m^2.s^{-3}$
γ	Rapport des capacités calorifiques massiques	—
λ	Coefficient de conductivité thermique	$J.m^{-1}.K^{-1}.s^{-1}$
μ	Coefficient de viscosité dynamique	$kg.m^{-1}.s^{-1}$
ν	Coefficient de viscosité cinématique	$m^2.s^{-1}$
Φ	Vecteur des paramètres d'entrée dans la table thermochimique	
ϕ	Scalaire quelconque	
Ψ	Vecteur d'état thermochimique tabulé	
Ψ_0	Vecteur d'état thermodynamique initial et/ou limite	
ρ	Masse volumique	$kg.m^{-3}$
σ_{ij}	Tenseur des contraintes	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_{ig}	Délai d'auto-inflammation	s
τ_{ij}	Tenseur des contraintes visqueuses	$kg.m^{-1}.s^{-2}$
τ_k	Temps de Kolmogorov	s
τ_k	Temps intégral	s
$\dot{\omega}_k$	Taux de réaction de l'espèce k	s^{-1}
$\dot{\omega}_T$	Dégagement chimique de chaleur	$J.kg^{-1}.s^{-1}$

Indices et exposants

Symbole	Signification
0	Relatif à l'état initial
a	Relatif à l'archétype considéré
ad	Adiabatique
b	Burnt

<i>eq</i>	Équilibre
<i>f</i>	Relatif au carburant (fuel)
<i>k</i>	Relatif à l'espèce <i>k</i>
<i>max</i>	Maximum
<i>min</i>	Minimum
<i>o</i>	Relatif à l'oxydant
<i>st</i>	Stœchiométrie
<i>t</i>	Turbulent
<i>th</i>	Thermique
<i>u</i>	Unburnt

Nombres sans dimension

Symbole	Signification
<i>Da</i>	Nombre de Damköhler
<i>F</i>	Nombre de Fourier
<i>Ka</i>	Nombre de Karlovitz
<i>K_n</i>	Nombre de Knudsen
<i>Le_k</i>	Nombre de Lewis associé à l'espèce <i>k</i>
<i>M</i>	Nombre de Mach
<i>Pr</i>	Nombre de Prandtl
<i>Re</i>	Nombre de Reynolds
<i>Re_λ</i>	Nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor
<i>Re_t</i>	Nombre de Reynolds turbulent
<i>Sc_k</i>	Nombre de Schmidt associé à l'espèce <i>k</i>

Acronymes

Symbole	Signification
CAI	Controlled Auto Ignition
CFL	Courant Friedrichs Lewy
CI	Compression Ignition
CORIA	COMplexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie
DNS	Direct Numerical Simulation
EGR	Exhaust Gas Recirculation
FGM	Flamelet Generated Manifold
FPI	Flame Prolongation of ILDM
HC	Hydrocarbure méthanique
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
IFM	<i>In situ</i> premixed Flamelets-generated Manifolds
IFP	Institut Français du Pétrole
IJLRA	Institut Jean Le Rond d'Alembert
ILDM	Intrinsic Low Dimensional Manifold

INSA	Institut National des Sciences Appliquées
LES	Large Eddy Simulation
MCR	Machine à Compression Rapide
MFM	Multidimensional Flamelet-generated Manifolds
MPI	Message Passing Interface
NSCBC	Navier–Stokes Characteristic Boundary Conditions
PDF	Probability Density Function
PIV	Particle Image Velocimetry
PLIF	Planar Laser Induced Fluorescence
PMB	Point Mort Bas
PMH	Point Mort Haut
PSR	Perfectly Stirred Reactor
TDC	Top dead center
THI	Turbulence homogène et isotrope
UPMC	Université Pierre et Marie Curie
SI	Spark Ignition
WALE	Wall-Adapting Local Eddy-viscosity

Chapitre 1

Introduction générale

Sommaire

1.1	Contexte environnemental	15
1.2	Généralités sur les moteurs à combustion interne	16
1.3	Vers l'auto-inflammation homogène	19
1.4	Objectifs de la thèse et plan du manuscrit	21

1.1 Contexte environnemental

La combustion est l'une des principales sources d'énergie et son utilisation est devenue indispensable et systématique aussi bien à l'échelle de l'industrie que des particuliers. Cependant, le recours massif à ce mode de production d'énergie n'est pas sans conséquences sur l'environnement : la combustion génère, entre autres, des gaz à effet de serre et des polluants, et les connaissances désormais disponibles sur le fonctionnement de la machine climatique amènent à conclure à la nécessité de réduire l'émission des produits de la combustion tels que le CO_2 et les polluants. On réalise alors la nécessité de mieux comprendre les mécanismes inhérents à la combustion afin de relever au mieux ce défi environnemental. L'un des principaux secteurs industriels visé par cette lutte contre la pollution est celui de l'automobile.

En effet, depuis 1993, avec l'entrée en vigueur de la norme EURO I relative aux émissions de polluants par les véhicules particuliers, la législation européenne impose aux constructeurs automobiles des limites de plus en plus strictes en termes de quantités de polluants générées par la combustion des moteurs, ramenées au kilomètre parcouru. En l'espace de 16 ans, cinq normes se sont ainsi succédées. Au fil des années, l'effort s'est concentré sur la réduction des émissions de monoxyde de carbone (CO), d'hydrocarbures méthaniques (HC), puis sur celles des monoxydes d'azote (NO_x) et des hydrocarbures non méthaniques (HCNM). Les limites imposées sur les différents polluants sont logiquement distinctes d'une technologie de moteur à l'autre. Leurs évolutions dans les normes associées aux moteurs Diesel et essence sont présentées respectivement dans les tables 1.1 et 1.2. La norme en vigueur actuellement et depuis 2009 est la norme EURO V et sera remplacée dès 2015 par la norme EURO VI qui se concentre plus spécifiquement sur les émissions des NO_x , des HC et des HCNM.

Pour mieux maîtriser la combustion et répondre aux contraintes imposées par les normes, de récentes améliorations technologiques ont été proposées et implantées sur les moteurs. Un descriptif de l'évolution

Norme Entrée en vigueur en	EURO I 1993	EURO II 1997	EURO III 2001	EURO IV 2006	EURO V 2011	EURO VI 2015
NO _x	-	-	500	250	180	80
CO	2720	1000	640	500	500	500
HC+ NO _x	970	900	560	300	230	170
Particules	140	100	50	25	5	5

TABLE 1.1 – Normes EURO relatives aux émissions polluantes des moteurs Diesel. Les quantités sont exprimées en mg/km.

Norme Entrée en vigueur en	EURO I 1993	EURO II 1997	EURO III 2001	EURO IV 2006	EURO V 2011	EURO VI 2015
NO _x	-	-	150	80	60	60
CO	2720	2200	2200	1000	1000	1000
HC	-	-	200	100	100	100
Particules	-	-	-	-	5	5
HCNM	-	-	-	-	68	68

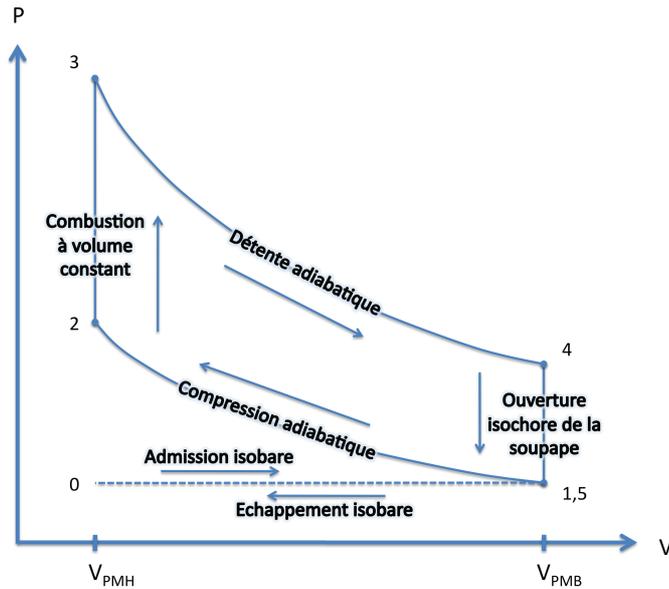
TABLE 1.2 – Normes EURO relatives aux émissions polluantes des moteurs à essence. Les quantités sont exprimées en mg/km.

des différentes technologies ainsi qu'un exposé des nouveaux axes de recherche sont introduits dans ce qui suit.

1.2 Généralités sur les moteurs à combustion interne

Le but d'un moteur à combustion interne est de convertir l'énergie chimique contenue dans le combustible, en général de l'essence ou du diesel, en énergie mécanique nécessaire au déplacement d'un véhicule. La technologie des moteurs à combustion interne n'a eu de cesse d'évoluer depuis sa première version, imaginée par Beau de Rochas en 1862 et mise en œuvre par Etienne Lenoir en 1883 pour le moteur essence et en 1896 pour le moteur Diesel, tous deux caractérisés par un régime de combustion spécifique.

Dans le moteur à essence, également appelés moteurs à allumage commandé, un mélange stœchiométrique quasi-homogène d'air et de carburant est introduit dans le cylindre. La combustion est initiée par un dépôt local d'énergie sous la forme d'une étincelle générée par une bougie, aux alentours du point mort haut (PMH). Dans les conditions idéales, une flamme de prémélange consomme alors les gaz frais par propagation et celle-ci s'éteint au contact des parois froides du cylindre où les pertes thermiques dominent le bilan d'énergie. Cependant, l'essence a une forte propension à s'auto-inflammer, rendant le contrôle de la combustion impossible pour des taux de compression (aussi appelés rapports volumétrique et notés RV) trop élevés. Ceux-ci sont définis comme le rapport entre le volume au point mort bas (PMB) V_{PMB} et le volume au PMH V_{PMH} et dans les moteurs à allumage commandé, leur valeur est généralement proche 10 :1, pouvant parfois atteindre 13 :1. Le cycle thermodynamique théorique

FIGURE 1.1 – Cycle théorique de Beau de Rochas dans le plan (P, V) .

approché par le fonctionnement optimal d'un moteur à essence est celui de Beau de Rochas, ou cycle d'Otto, ou encore cycle à pression constante, dont le principe est rappelé dans le diagramme (P, V) présenté sur la figure 1.1.

Le rendement thermique théorique $\eta_{th}^{essence}$ est défini comme le rapport entre, le travail récupéré par le piston entre 3 et 4, et, l'énergie thermique produite par la combustion entre 2 et 3. La pertinence de $\eta_{th}^{essence}$ obtenu à partir du cycle Beau de Rochas comme indicateur du rendement thermique d'un moteur essence est en grande partie conditionnée par la validité de l'hypothèse forte de combustion à pression constante. Cependant, les deux rendements doivent montrer qualitativement les mêmes tendances lorsqu'on fait varier le rapport volumétrique RV . Ainsi, en montrant que $\eta_{th}^{essence}$ peut s'exprimer en fonction de γ , le rapport des capacités calorifiques, et RV comme

$$\eta_{th}^{essence} = 1 - \frac{1}{RV^{\gamma-1}}, \quad (1.1)$$

on déduit que, d'un point de vue thermodynamique, une limite du rapport de compression équivaut à une limite du rendement thermique et c'est là que réside la principale faiblesse du moteur à essence.

Trois principaux polluants sont générés par le fonctionnement de ce type de moteur. La formation du monoxyde de carbone (CO) résulte de la dissociation de dioxyde de carbone à hautes températures et son oxydation est en outre ralentie par les effets de détente, lorsque le piston redescend. Globalement, le temps de séjour du gaz dans la chambre ne permet pas à la combustion d'être complète. Des hydrocarbures imbrûlés, produit par combustion incomplète, sont induits par piégeage dans les volumes morts de la segmentation, du joint de culasse ou du filet de bougie, ou encore par adsorption dans le film d'huile. Enfin, à cause des niveaux de température pouvant excéder les 2500 K atteints dans les gaz brûlés, du monoxyde d'azote (NO), dit thermique, est aussi créé.

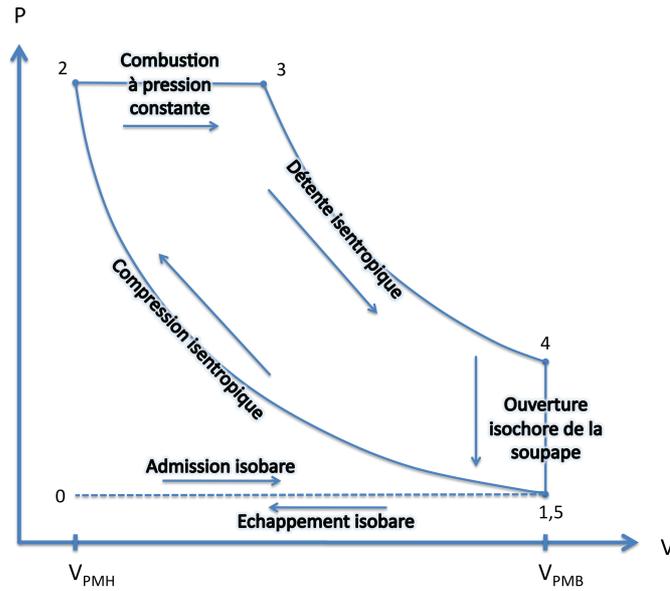


FIGURE 1.2 – Cycle théorique de Diesel dans le plan (P, V) .

Pour les moteurs Diesel ou moteurs à allumage par compression, seul l'air est introduit dans le cylindre à l'admission, en début de cycle. Le carburant est injecté peu avant le point mort haut et les conditions thermodynamiques obtenues grâce aux forts rapports volumétriques (environ 18 :1) provoquent l'auto-inflammation du mélange hétérogène dans les zones de richesse favorable, une flamme de diffusion séparant alors les différentes zones du cylindre. On présente sur la figure 1.2 le cycle thermodynamique théorique de Diesel dans un diagramme (P, V) décrit lors d'un fonctionnement modélisé du moteur Diesel. Son rendement thermique η_{th}^{diesel} est également défini comme le rapport entre le travail cédé au piston durant la détente isentropique 3,4, et la chaleur de combustion produite durant la phase 2,3 qui est, cette fois-ci, supposée se produire à pression constante. On montre qu'il s'exprime selon la relation

$$\eta_{th}^{diesel} = 1 - \frac{1}{RV^{\gamma-1}} \frac{TI^{\gamma} - 1}{\gamma(TI - 1)}, \quad (1.2)$$

où $TI = \frac{V_3}{V_2}$ est le taux d'injection. Cette relation est donnée à titre indicatif car elle n'est suffisante pour conclure sur les performances respectives des deux types de moteurs. Cependant, compte-tenu des rapports volumétriques bien supérieurs dans les moteurs Diesel que dans les moteurs à essence, on montre que pour une quantité égale de combustible brûlé, le rendement thermique du moteur Diesel est meilleur que celui du moteur essence. Ce point constitue l'avantage majeur des moteurs à allumage par compression.

Pour un moteur Diesel, même si la richesse du mélange dans le cylindre est globalement inférieure à 1, celui-ci peut localement être riche, ce qui favorise la formation de suies. De surcroît, la contingence haute température et richesse proche de 0.9, implique la formation de NO_x .

Les architectures actuelles conservent le principe de fonctionnement de ces premiers moteurs, tout en essayant d'en tirer le meilleur parti. On pense, par exemple, aux stratégies d'hybridation, c'est-à-dire de couplage entre un moteur thermique utilisé sur ses points de fonctionnement optimaux, par exemple

lorsque la vitesse est élevée ou qu'on souhaite de l'accélération, et un moteur électrique qui assure la propulsion du véhicule lorsque le moteur thermique montre ses faiblesses, notamment dans les régimes de fonctionnement transitoires. Lorsqu'une très forte accélération est demandée, les deux moteurs peuvent fonctionner simultanément et en phase de décélération le moteur électrique est utilisé en tant qu'alternateur. D'un point de vue technique, l'un des points clef de cette technologie réside dans la gestion du fonctionnement des deux moteurs par l'électronique embarquée. En effet, cette dernière doit tenir compte de l'état de charge de la batterie, de la température du moteur thermique et de celle du catalyseur, des besoins en chauffage et en climatisation et de la pression sur les pédales d'accélérateur et de frein. Ainsi, en optimisant l'utilisation du moteur à combustion interne, l'hybridation permet de réduire les émissions de polluants de la combustion, ainsi que la production de gaz à effet de serre. De plus, afin de mieux maîtriser la combustion, des stratégies de contrôle de l'aérodynamique interne et du mélange introduit dans le cylindre ont été proposées, comme l'injection directe à très haute pression (2000 Bar) aussi appelée Common Rail, en parallèle à des systèmes de post-traitement des gaz d'échappement (catalyseurs de NO_x par DeNO_x) visant à réduire les émissions de polluants.

Le rendement global des moteurs à combustion interne a également pu être amélioré grâce à des stratégies de downsizing, basées sur le principe de réduction de la cylindrée, c'est-à-dire la taille et la masse du moteur, en conservant la puissance. En effet, plus les pistons sont massifs, plus l'énergie nécessaire pour inverser leur sens de déplacement est élevée et de manière complémentaire, plus les pistons sont légers, plus le régime moteur et donc sa puissance peuvent être élevés. En outre, les frottements correspondent à des pertes d'énergie et donc à des augmentations de consommation. Ils sont d'autant plus faibles que les surfaces en contact sont petites et donc, que le moteur est petit. Enfin, plus le volume est petit, plus le mélange est facile à opérer, ce qui limite la production d'imbrûlés. A régime égal, maintenir la puissance d'un moteur en réduisant sa cylindrée implique d'augmenter la quantité de mélange réactif à brûler par unité de volume. C'est le rôle du turbocompresseur qui, en augmentant la pression de l'air à l'entrée du moteur, permet d'augmenter la charge admise dans chaque cylindre.

Les progrès apportés par les développements précédents sont très encourageants, mais pour répondre aux exigences des normes à venir, le secteur de la Recherche et Développement se doit de maintenir ses efforts pour imaginer de nouvelles stratégies et concevoir de nouvelles technologies capables de diminuer les émissions polluantes à la source pour les moteurs Diesel et à réduire la consommation pour les moteurs essence. Les nouveaux concepts sont basés sur des variantes des moteurs essence ou Diesel au niveau de la structure de moteur. Cependant, la nature des flammes permettant le développement de la combustion reste globalement identique à celle exploitée historiquement dans ces deux types de moteurs, à savoir les flammes de prémélange dans le cas d'un moteur à allumage commandé ou de diffusion pour l'allumage par compression. Une idée prometteuse réside dans l'exploitation d'un mode de combustion hybride : l'auto-inflammation dans un milieu homogène en composition.

1.3 Vers l'auto-inflammation homogène

La combustion par auto-inflammation en régime homogène semble constituer un important levier d'action dans cette course à l'optimisation et au contrôle de la combustion : en utilisant les particularités techniques qui font la force des deux types de moteurs présentés précédemment, tout en contournant leurs

faiblesses respectives, elle doit permettre, en théorie, de générer des niveaux d'émission de polluants similaires aux moteurs essence, avec des rendements semblables à ceux obtenus dans les moteurs Diesel. Elle s'applique aussi bien dans le cas d'un moteur à base Diesel sous le nom de HCCI (Homogenous Charge Compression Ignition) que dans le cas d'une base essence sous le nom de CAI (Controlled Auto-Ignition). En pratique, dans ce type de moteur, la charge théoriquement homogène ou faiblement stratifiée en composition, est comprimée jusqu'à ce que les conditions thermodynamiques permettent l'initiation spontanée et en masse de la combustion. Si dans le moteur Diesel, le dégagement d'énergie converti en travail par le piston est généré principalement par des flammes dites de diffusion, ces dernières sont en théorie inexistantes grâce à l'homogénéité du mélange. L'auto-inflammation homogène permet d'obtenir des émissions de NO_x extrêmement faibles, sans traitement post-combustion. Les quantités de suie produites sont elles aussi fortement diminuées, mais doivent toujours être post-traitées afin de respecter les normes présentées dans les tableaux 1.1 et 1.2. Les niveaux de monoxyde de carbone produits restent élevés à cause du niveau de température de combustion plus faible.

L'idée d'une combustion homogène existe depuis le 19^{ème} siècle, mais c'est seulement depuis les 20 dernières années qu'elle a pu être étudiée plus en détails, grâce aux progrès concomitants des techniques expérimentales de diagnostic optique et des capacités de calculs : ces deux outils d'investigation permettent une analyse complémentaire des processus physico-chimiques à l'œuvre.

Le potentiel de cette idée à tout d'abord été éprouvé expérimentalement par Onishi *et al.* [97] en 1979, sous le nom de Active Thermo-Atmosphere Combustion, sur un moteur deux temps en fonctionnement à charges partielles. D'après les auteurs, elle permet d'augmenter la stabilité de la combustion tout en réduisant la consommation et les émissions polluantes et en limitant le bruit et les vibrations. Peu de temps après, des mesures par spectroscopie effectuées par Noguchi [96] ont confirmé ces premières observations. Il a été observé que la combustion en régime HCCI est bien répartie dans le temps et que la consommation du moteur ainsi que les émissions sont bien réduites par ce procédé. Ces deux premières études sont consacrées plus spécifiquement aux moteurs deux temps. En 1983, les performances du mode de combustion HCCI sont testées pour la première fois sur un moteur quatre temps par Najt *et al.* [91]. Les auteurs montrent l'analogie entre les processus chimiques qui mènent au cliquetis dans le cas des moteurs à allumage commandé et l'auto-inflammation en régime HCCI et concluent que ce mode de combustion est contrôlé par les distributions des champs de température, de pression et de composition, montrant ainsi que, loin de se réduire à une analyse cinétique 0D, l'étude de l'auto-allumage homogène ouvre un champ d'investigation beaucoup plus vaste qu'il n'y paraît à première vue.

Il reste ainsi de nombreuses contraintes techniques à surmonter avant de pouvoir imaginer une implantation industrielle de ce mode de combustion dans les moteurs à combustion interne et notamment, en amont de l'industrialisation, une analyse physique fine du comportement hautement instationnaire de l'auto-inflammation en homogène doit être menée. Même si le mélange est théoriquement parfait, des inhomogénéités de température et de composition, aussi faibles soient-elles, subsistent dans les cylindres peu avant l'auto-allumage et compte tenu de l'extrême sensibilité de la physique de ce phénomène à aux paramètres thermo-chimiques, l'initiation et le développement de l'auto-inflammation sont nécessairement affectés et des régimes de combustion dégradés avec des effets parfois destructeurs peuvent être générés.

1.4 Objectifs de la thèse et plan du manuscrit

La genèse de l'auto-inflammation dans un moteur est un phénomène instationnaire par nature. La topologie des zones d'initiation de la combustion ou noyaux d'auto-inflammation résulte de l'interaction non-linéaire entre la turbulence et les champs thermo-chimique et dépend donc fortement des détails fins de l'historique de l'écoulement. Cependant, les mécanismes d'interaction menant à la formation de noyaux plus réactifs sont aujourd'hui encore mal connus et la physique de l'auto-inflammation contient encore sa part d'ombre.

De leur côté, les puissances de calcul n'ont eu de cesse d'augmenter, comme l'atteste la figure 1.3. Le nombre d'opérations en virgule flottante par seconde a ainsi pu être multiplié par environ 104 sur les

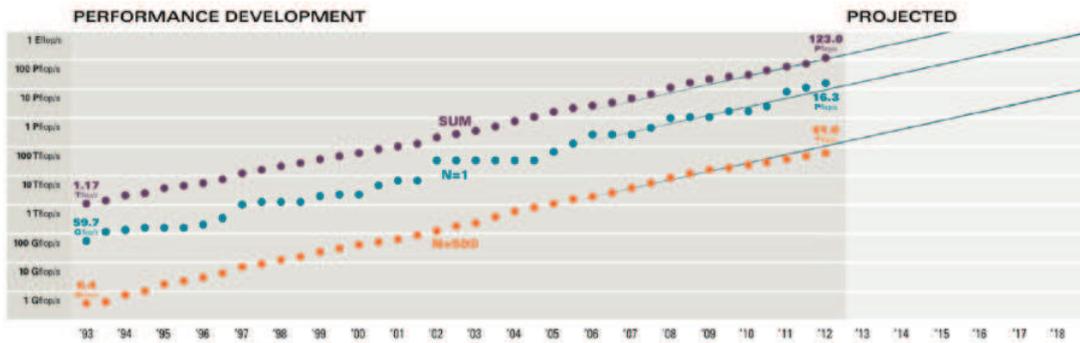


FIGURE 1.3 – Evolution des puissances de calcul sur les 19 dernières années. Orange : 500^{ème} calculateur ; bleu : 1^{er} calculateur ; violet : somme des puissances de calcul des 500 plus puissants supercalculateurs du monde.

19 dernières années, soit une augmentation annuelle d'environ 27%.

L'objectif de ce travail est donc de tirer parti des développements récents des puissances de calcul afin d'étudier plus en détail l'auto-allumage et le développement consécutif de la flamme par le biais de simulations numériques directes (ou DNS). Dans ce manuscrit, les tenants et aboutissants de ces trois années de thèses seront développés en quatre chapitres :

1. dans le chapitre 2, une étude bibliographique permettra de synthétiser les connaissances sur la physique de l'auto-allumage disponibles à l'heure actuelle d'un point de vue expérimental et numérique, afin de mieux cerner la problématique de la combustion en mode homogène dans les moteurs à combustion interne ;
2. le chapitre 3 introduira, en premier lieu, les équations fondamentales de l'aérothermochimie, ainsi que les grandeurs permettant de caractériser la combustion turbulente. Puis, les différentes méthodes numériques mises en oeuvre dans le code DNS et LES SiTCom, intégrateur numérique des équations de l'aérothermochimie, seront présentées ;
3. à l'occasion du chapitre 4, on présentera la stratégie de modélisation des phénomènes thermo-chimiques par tabulation ; dans ce contexte, une méthode alternative développée durant cette thèse sera décrite. Elle est basée sur la résolution *in-situ* de la thermo-chimie associée aux flammelettes de prémélange 1D, stationnaires et prend en compte l'étirement. Son potentiel sera également éprouvé ;

4. L'étude numérique de l'écoulement réactif dans la machine à compression rapide étudiée expérimentalement à l'Institut Jean le Rond d'Alembert (Université Pierre et Marie Curie), sera exposée dans le chapitre 5. Tout d'abord, la stratégie de modélisation, basée principalement sur une procédure de calibration développée pour la mise en données des simulations numériques directes, sera décrite en détails. Puis, l'analyse de simulations numériques directes de l'écoulement dans la chambre de combustion sera menée. On tentera de répondre aux questions suivantes :
- quelles sont les propriétés de l'écoulement qui contrôlent les régimes d'auto-inflammation homogène et fragmenté ?
 - comment le régime d'auto-inflammation est-il relié à la distribution spatiale et temporelle de la température ?
 - quelles sont les conséquences de ces deux régimes d'auto-inflammation sur la propagation de la combustion dans la chambre ?
- Un diagramme des régimes d'auto-allumage dans un écoulement homogène en composition synthétisera cette analyse.
5. Les conclusions et perspectives des travaux présentés clôtureront ce manuscrit.

Chapitre 2

Physique de l'auto-allumage

Sommaire

2.1	Introduction	23
2.2	Revue générale	24
2.2.1	Les différentes phases de l'auto-inflammation	24
2.2.2	Analyse théorique	24
2.2.3	Simulations numériques directes	26
2.3	L'auto-inflammation dans un milieu homogène en composition	36
2.3.1	Introduction	36
2.3.2	Etude expérimentale	38
2.3.3	Etudes numériques et modélisation	42
2.4	Conclusions	48

2.1 Introduction

Le phénomène d'auto-inflammation est caractérisé par une initiation spontanée (*i.e.* sans dépôt local d'énergie) de la combustion lorsque les conditions thermochimiques du milieu réactif sont favorables, après un délai plus ou moins long appelé délai d'auto-inflammation qui sera noté τ_{ig} dans la suite de ce manuscrit. Il correspond à la durée nécessaire pour que les espèces radicalaires responsables de la propagation chimique de la réaction aient été formées en concentration suffisante. Lorsque l'on souhaite exploiter l'auto-inflammation, elle est souvent obtenue par une forte compression volumétrique responsable d'une augmentation simultanée de la température, de la pression et de la masse volumique. Cependant, dans les moteurs essence, ce phénomène peut être généré de façon incontrôlée et prend alors le nom de cliquetis. Dans certaines conditions critiques, des niveaux de pression et de température élevés peuvent être atteints dans des zones homogènes de gaz frais : ces régions peuvent alors s'auto-inflammer en masse, générant un dégagement de chaleur brutal pouvant être associé à de fortes ondes de pression ainsi que des points chauds. Dans ce cas, ce phénomène peut mener à la destruction du moteur.

L'auto-inflammation est donc un phénomène très sensible et ses mécanismes doivent être compris si l'on souhaite l'exploiter. Pour y parvenir, les processus thermochimiques d'une part, les détails fins de l'écoulement d'autre part, et leurs interactions doivent être appréhendés. Les premières bases théoriques permettant sa description furent jetées dès le début des années 1930, dans le contexte plus large de la

théorie moderne de la combustion et de la détonation, mais ce n'est que récemment que des études théoriques, expérimentales et numériques se sont focalisées sur l'auto-inflammation en temps que domaine à part entière de la combustion. Un état des lieux des recherches récentes est présenté dans la première section de ce chapitre. Ces analyses sont ensuite transposées au cas particulier de l'auto-allumage en homogène et affinées dans le but de mieux comprendre les mécanismes qui lui sont propres.

En plus de présenter un aperçu des différents travaux menés sur l'auto-inflammation, l'objectif de ce chapitre est d'identifier les différentes zones d'ombres à éclaircir aux niveaux de la physique de ce phénomène dans les moteurs HCCI/CAI, afin de définir les axes d'études de cette thèse.

2.2 Revue générale

2.2.1 Les différentes phases de l'auto-inflammation

Pour aborder l'étude du phénomène de l'auto-inflammation et introduire les principales problématiques qui en découlent, Bartenev et Gelfand [3] proposent de le réduire conceptuellement en trois phases caractéristiques, plus ou moins arbitrairement :

- **Initiation** : le front d'onde d'auto-inflammation est initié dans une zone de l'écoulement où les propriétés thermo-chimiques favorables rendent ce dernier plus réactif qu'ailleurs. Ce noyau peut être vu de manière équivalente comme une région où le champ de délai d'auto-inflammation atteint sa valeur minimale. Il peut prendre la forme d'un point chaud ou d'une zone de plus forte concentration en radicaux. Dans ce qui suit, l'initiation désignera également la phase durant laquelle les processus chimiques sont très lents et où les contributions de phénomènes de mélange, laminaires (par diffusion moléculaire) ou turbulents (par transport turbulent), pilotent l'évolution des grandeurs thermo-chimiques.
- **Propagation** : la réaction chimique ayant été amorcée au niveau du centre d'initiation, on peut définir le mode théorique de propagation indépendamment des processus propres à la dynamique des gaz. Ce point sera abordé en détails dans la section suivante.
- **Transition** : le caractère non-linéaire du couplage entre la dynamique des gaz et la chimie induit des transitions entre les différents régimes propagatifs.

2.2.2 Analyse théorique

L'auto-inflammation a été abordée d'un point de vue théorique par Zel'dovich [133] en 1980. Il propose un point de vue nouveau selon lequel le développement temporel de certains modes de propagation de la combustion est conditionné uniquement par la distribution spatiale initiale du délai d'auto-inflammation, celle-ci résultant des inhomogénéités des champs initiaux associés aux grandeurs thermo-chimiques. Cette étude se focalise tout particulièrement sur les régimes de propagation adoptés par la flamme initiée par auto-allumage. Pour développer son analyse, l'auteur introduit le concept clef d'onde de propagation spontanée, basé sur les hypothèses physiques suivantes :

- L'écoulement, considéré comme unidimensionnel, est initialement au repos ;
- Le champ de température est parfaitement connu juste avant l'auto-inflammation, c'est-à-dire juste avant le brusque dégagement de chaleur qui la caractérise ;
- Ce champ est suffisamment lisse (gradients faibles) pour que les interactions liées à la diffusion entre volumes fluides puissent être négligées et seules d'éventuelles ondes acoustiques peuvent

permettre la communication entre différents points de l'écoulement. Le fluide est donc considéré comme une collection de réacteurs adjacents où l'explosion thermique se produit de manière indépendante.

L'auto-allumage du milieu se produit par l'auto-allumage séquentiel des réacteurs, selon une onde d'auto-inflammation spontanée dont la vitesse de propagation u_{sp} est intégralement déterminée par la distribution spatiale du délai d'auto-inflammation des réacteurs

$$\mathbf{u}_{sp} = \frac{\nabla \tau_i}{|\nabla \tau_i|^2}. \quad (2.1)$$

En comparant cette vitesse aux vitesses caractéristiques dans un écoulement réactif compressible, à savoir les vitesses de détonation D_{cl} , du son a et de flamme laminaire S_L^0 dans les mêmes conditions thermodynamiques, il devient possible d'anticiper et de classer le comportement propagatif de l'auto-inflammation selon trois régimes de propagations différents :

- pour une distribution homogène de température, la vitesse de propagation de l'onde d'auto-inflammation spontanée est infinie ; ce cas limite correspond donc à une explosion thermique où tous les volumes fluides s'auto-inflamment simultanément ;
- si la vitesse de propagation de l'onde est proche de la vitesse du son ($u_{sp} \approx a$), l'onde de pression générée par l'auto-allumage du premier réacteur apporte sa contribution énergétique au dégagement de chaleur du second et ainsi de suite. Ce mécanisme de couplage constructif entre la chimie et l'acoustique peut conduire à la formation d'une onde de détonation ;
- si la vitesse de propagation de l'onde d'auto-inflammation spontanée est très inférieure à la vitesse du son, mais supérieure à la vitesse de flamme laminaire ($S_L < u_{sp} \ll a < D_{cl}$), l'onde d'auto-inflammation se propage beaucoup moins vite que les ondes acoustiques et la pression a le temps de s'uniformiser en aval du front de propagation spontanée, sans couplage constructif entre la chimie et l'acoustique. Les effets de couplage entre les volumes fluides adjacents apparaissent et le front d'auto-inflammation ne peut plus être vu simplement comme résultat de la distribution initiale du délai d'auto-inflammation. On franchit ici la limite de la validité du modèle de front d'auto-inflammation spontané.
- Enfin, dans le cas où la vitesse de propagation de l'onde est inférieure à la vitesse de flamme laminaire ($u_{sp} < S_L$) dont la propagation est entièrement pilotée par les phénomènes de diffusion, il n'est plus possible d'isoler une onde de propagation d'origine chimique de celle propre à la dynamique du fluide.

Les travaux théoriques de Zel'dovich sont repris en 1991 par Makhviladze et Rogatykh [80]. Dans cette publication, les auteurs s'attachent à déterminer les conditions propices au développement d'une onde de détonation. Ce phénomène destructeur doit en effet être impérativement compris et évité dans une chambre de combustion et un critère concernant les conditions initiales doit être identifié pour caractériser le domaine de risque. Le problème modèle est le suivant :

- l'écoulement réactif est unidimensionnel ;
- les processus chimiques sont modélisés à l'aide d'une réaction à une étape, impliquant 2 espèces ;
- on impose une distribution initiale de température linéaire et décroissante sur la première partie du domaine ; sur la seconde, la température est homogène et minimale. On introduit donc un gradient caractéristique défini à l'aide d'une dimension x_u correspondant à l'extension spatiale de la zone d'inhomogénéité, ainsi que d'une amplitude de l'inhomogénéité de température ;
- la pression et les fractions massiques sont homogènes sur tout le domaine ;

- le fluide est au repos.

Pour ces conditions initiales, les équations de conservation ne font plus apparaître d'opérateur spatial couplant les différents volumes adjacents entre eux et la solution décrit leur explosion séquentielle, initiée au niveau du volume fluide de température maximale ; une onde d'auto-inflammation spontanée est générée selon le mécanisme proposé par Zel'dovich. Les processus chimiques sont décrits de façon extrêmement simple, de telle sorte qu'une solution analytique déterminant la distribution du délai d'auto-inflammation existe. En conséquence, le champ 1D de u_{sp} peut également être déterminé analytiquement. Sans entrer dans les détails techniques, quatre quantités sans dimension sont utilisées pour paramétrer les propriétés du système : elles sont reliées au gradient de température initial, et aux propriétés thermodynamiques et cinétiques du mélange réactif. Ces paramètres sont utilisés pour classer les différents régimes d'auto-inflammation. Plus précisément, en traduisant les critères de Zel'dovich selon ces quatre paramètres, les auteurs extraient analytiquement un critère simple, permettant de délimiter le domaine de réaction détonante. La même démarche est ensuite transposée au cas d'une inhomogénéité initiale de composition. Les auteurs montrent que les prédictions obtenues à l'aide de ces critères sont conformes aux résultats numériques et prouvent ainsi la pertinence de leur approche, pour les cas d'inhomogénéités initiales de température, et de composition.

Dans les deux études présentées précédemment, l'écoulement et les processus chimiques sont simplifiés à l'extrême. Les travaux exposés dans ce qui suit se basent sur les analyses théoriques introduites ci-dessus, mais les cas étudiés numériquement sont complexifiés par couches successives, afin d'aborder des configurations plus réalistes, aussi bien du point de vue de l'aérodynamique que de la cinétique chimique.

2.2.3 Simulations numériques directes

2.2.3.1 Principes

La simulation numérique directe (DNS) est l'approche la plus précise ; en capturant toutes les échelles spatio-temporelles contribuant à la dynamique de l'écoulement ainsi que celles propres à la chimie, la physique dont elle rend compte est supposée exacte¹. Pour illustrer les difficultés inhérentes à cette approche directe, on supposera que c'est la description des phénomènes chimiques qui impose les contraintes les plus fortes du point de vue du maillage. Pour se représenter les dimensions du problème, on considère que l'épaisseur thermique du front de flamme est de l'ordre de $100\mu\text{m}$, et elle diminue significativement avec la pression. Il est montré dans [103] qu'en prémélangé, un minimum de 10 points est nécessaire à la discrétisation de cette longueur chimique pour capturer correctement les détails fins de la flamme, ce qui impose donc une taille de maille de l'ordre de $10\mu\text{m}$. Ainsi, si la longueur caractéristique de la configuration étudiée est de l'ordre du cm, le nombre de mailles est, en 3D, de l'ordre de 10^9 , et on ne prend pas encore en compte les contraintes sur le pas de temps d'intégration numérique imposées par les espèces intermédiaires qui ont un temps caractéristique d'évolution extrêmement petit (*c.f.* § 3.3.1.3). Les exigences liées à la résolution des échelles chimiques imposent donc une importante limitation sur les dimensions du domaine physique que l'on peut aborder par simulation numérique directe. Cette approche n'est actuellement pas envisageable dans le cadre de configurations 3D complexes au vu des puissances de calcul disponibles. Cependant, en abordant les problèmes sous une forme canonique, elle montre tout

1. C'est pourquoi les calculs DNS servent de référence dans la validation de modèles.

son potentiel et permet de mettre en avant un certain nombre de mécanismes fondamentaux. Dans cette optique, de nombreux travaux ont été dédiés à l'étude de l'auto-inflammation.

2.2.3.2 A la lumière de la théorie de Zel'dovich

L'analyse théorique de Zel'dovich [133] a pu être généralisée numériquement à des systèmes physiques plus réalistes.

Pour un schéma cinétique simple ($H_2/CO/air$) mais toutefois plus réaliste que dans le cas précédent, Bradley [6] et Gu *et al.* [46] ont étudié numériquement les différents modes de propagation du front de réaction généré à partir de points chauds en modélisant le problème de la façon suivante :

- le champ de température initial T_0 est homogène partout en espace sauf au niveau du point chaud ;
- ce dernier est représenté par une boule de rayon initial r_0 où la température est une fonction parabolique de la distance au centre.
- les grandeurs thermochimiques autres que la température sont initialement considérées comme homogènes.
- l'écoulement est au repos.

En utilisant 2.1 et en remarquant qu'initialement, le délai d'auto-inflammation n'est fonction que de $T_0(r)$, les auteurs proposent le changement de variable

$$u_{sp} = \left(\frac{\partial \tau_i}{\partial r} \right)^{-1} = \left(\frac{\partial \tau_i}{\partial T_0} \frac{\partial T_0}{\partial r} \right)^{-1}, \quad (2.2)$$

dont ils déduisent une condition nécessaire au développement d'une onde de détonation,

$$u_{sp}^{det} = \left(\frac{\partial \tau_i}{\partial T_0} \right)^{-1} \left[\left(\frac{\partial T_0}{\partial r} \right)_c \right]^{-1} = a. \quad (2.3)$$

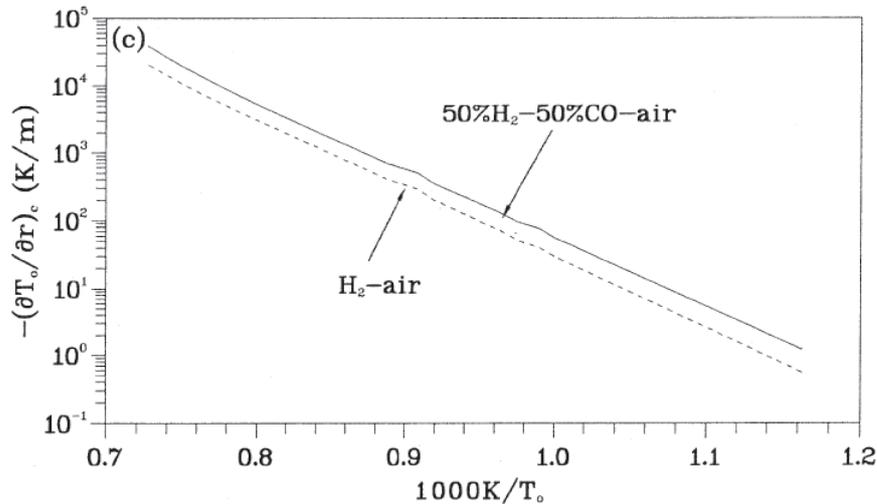


FIGURE 2.1 – Valeur du gradient critique de température initiale, pour deux mélanges réactifs, à 5.066 MPa, extrait de [46].

Les valeurs du gradient critique de température initiale $(\partial T_0 / \partial r)_c$, tracées en fonction de l'inverse de la température initiale, sont représentées sur la courbe 2.1, pour deux mélanges réactifs. Après avoir

introduit le nombre adimensionnel ξ défini par

$$\xi = \left(\frac{\partial T_0}{\partial r} \right) \left(\frac{\partial T_0}{\partial r} \right)_c^{-1}, \quad (2.4)$$

et comparant le gradient de température initial local avec sa valeur correspondant à la détonation ($\xi < 1$, *resp.* $\xi > 1$, valeur du gradient de température initiale plus faible que celui menant à la détonation, *resp.* plus grande), les auteurs réécrivent l'équation 2.2 sous la forme

$$u_{sp} = a\xi^{-1}. \quad (2.5)$$

Dès lors, il devient possible de caractériser les cinq régimes de propagation du front de réaction mis en évidence théoriquement par Zel'dovich [133] en termes de ξ . Le développement de l'onde de détonation étant attendu sur une gamme de valeurs de ξ , une limite inférieure ξ_l et une limite supérieure ξ_u sont introduites. La classification suivante est obtenue :

- $\xi = 0$: dans ce cas, il n'existe initialement aucune inhomogénéité et le mélange s'auto-inflamme en masse. Les paramètres clés sont ici le délai d'auto-inflammation τ_{ig} et le délai d'excitation (ou d'emballement) τ_e correspondant à la durée séparant l'instant où le taux de dégagement de chaleur atteint 5% de sa valeur maximale et l'instant où cette valeur maximale est atteinte ;
- $0 < \xi < \xi_l$: onde de déflagration supersonique (onde d'auto-inflammation supersonique, pas de couplage avec l'onde de pression due au dégagement de chaleur) ;
- $\xi_l \leq \xi < \xi_u$: développement de l'onde de détonation ;
- $\xi_u \leq \xi < aS_l^{-1}$: onde de déflagration subsonique (onde d'auto-inflammation subsonique) ;
- $\xi \geq aS_l^{-1}$: régime des flammes de prémélange laminares.

Les auteurs soulignent cependant qu'en définissant un critère ξ basé sur les gradients de températures qui existent initialement, on ne tient pas compte des phénomènes de diffusion de masse et de chaleur qui peuvent avoir lieu lors de la phase d'induction. Si le temps caractéristique d'induction est comparable au temps caractéristique du phénomène de diffusion de la chaleur, ce dernier peut modifier significativement la distribution initiale de température : en toute rigueur, il faudrait supposer ici que $(\partial T_0 / \partial r)_c$ est obtenu au terme de la phase d'induction, sinon, une correction est nécessaire. Ainsi, $\xi = 1$ ne peut être qu'un indicateur approximatif d'un régime de détonation, et c'est la raison pour laquelle un domaine de risque $[\xi_l, \xi_u]$, plutôt qu'une valeur unique, est utilisé ici.

Il reste à déterminer un paramètre permettant de rendre compte de la largeur du domaine $[\xi_l, \xi_u]$ dans lequel le développement et l'établissement d'une onde de détonation sont attendus. Pour que le renforcement mutuel de l'onde d'auto-inflammation et de l'onde de pression, résultant du dégagement de chaleur, puisse donner lieu à une onde de détonation suffisamment énergétique pour persister dans le temps, cette chaleur doit être libérée à un taux suffisant. En notant r_0 la dimension caractéristique de l'extension spatiale de $(\partial T_0 / \partial r)_c$, (i.e. $(\partial T_0 / \partial r)_c \approx T_0^{max} - T_0^{min} / r_0$), on peut comparer le temps caractéristique de l'onde de pression (r_0 / a) à celui du dégagement de chaleur que l'on identifie au temps d'excitation τ_e . Il vient ainsi le nombre adimensionnel suivant appelé nombre d'excitations, tel que

$$n_e = \frac{r_0 / a}{\tau_e}. \quad (2.6)$$

Il est montré qu'en augmentant n_e , c'est-à-dire en diminuant τ_e (augmentation du dégagement de chaleur durant le temps caractéristique de l'onde de pression), on augmente également le domaine $[\xi_l, \xi_u]$

favorable au développement d'un front de détonation (*c.f.* figure 2.2), ce qui était attendu. n_e constitue un critère supplémentaire pertinent.

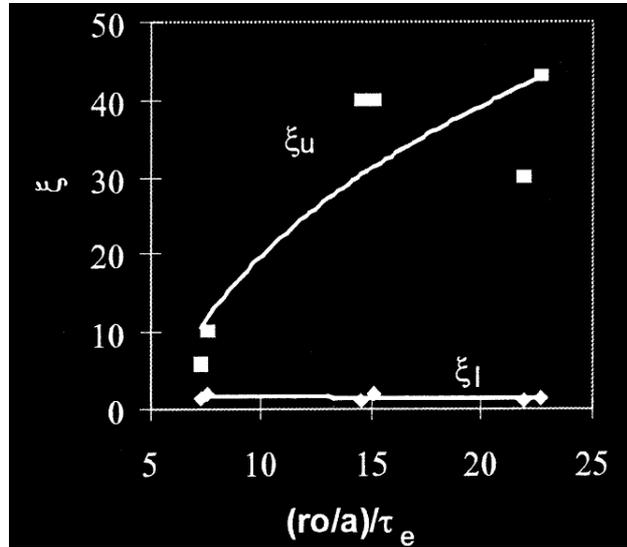


FIGURE 2.2 – Evolutions de la limite inférieure (ξ_l) et supérieure (ξ_u) du domaine de détonation, en fonction du nombre d'excitation $n_e = (r_0/a)/\tau_e$, extrait de [46].

Ainsi, l'idée de Zel'dovich permet de développer des outils théoriques puissants. Néanmoins, dans un cas réel, compte-tenu de l'extrême sensibilité du phénomène d'auto-inflammation, cette approche simplifiée se montre limitée. En effet, l'hypothèse selon laquelle le régime de propagation lors de l'auto-inflammation n'est conditionné que par la distribution spatiale initiale du délai d'auto-inflammation n'est acceptable que dans le cadre d'une configuration simplifiée dans laquelle seule une zone d'inhomogénéité n'est considérée (pour ne pas avoir à considérer des interactions non-linéaires entre différents modes propagatifs) et dans laquelle les temps caractéristiques des phénomènes de diffusion de la chaleur ou des espèces réactives sont beaucoup plus grands que les délais d'auto-inflammation comme souligné dans [46]. Les auteurs introduisent alors l'idée de critères effectifs pour tenter de prendre en compte la perturbation du champ initial du délai d'auto-inflammation engendrée par la diffusion. En outre, les travaux dans [3] soulignent un autre biais essentiel de ce modèle : compte-tenu de la propriété de continuité des champs thermo-chimiques impliquant la continuité de la distribution initiale du délai d'auto-inflammation, il est évident que, dans un écoulement réactif réel, il doit exister simultanément une variété continue d'interactions.

2.2.3.3 Approches alternatives

La complexité du phénomène d'auto-inflammation dans un milieu réactif réel présentant des inhomogénéités sur une large gamme d'échelles spatiotemporelles inhérentes à la turbulence rend la théorie de Zeldovich difficilement applicable. Il apparaît donc nécessaire d'aborder la physique de l'auto-inflammation sous un autre angle.

Etude du couplage turbulence/dégagement de chaleur global, schémas cinétiques simples

Domingo et Vervisch [22] proposent en 1996 d'étudier numériquement l'auto-inflammation d'un mélange partiel subissant une compression et dont la richesse globale est proche de la stoechiométrie, par des calculs de type DNS. La chimie est décrite par le biais d'un schéma à une étape. La compression est modélisée numériquement par l'ajout d'un terme source homogène dans l'espace dans les équations de transport ; il est donc supposé que la masse volumique s'homogénéise instantanément dans le domaine, c'est-à-dire que l'écoulement est de type bas Mach du point de vue de la compression. L'étude se focalise d'abord sur la caractérisation du mélange laminaire ou turbulent ayant lieu avant l'auto-allumage. Durant la phase de compression, c'est-à-dire avant le brusque dégagement de chaleur caractéristique de l'auto-allumage, la formation de noyaux prémélangés n'est pilotée, dans cette modélisation du problème, que par les phénomènes de diffusion dont le taux de dissipation scalaire χ_Z de la fraction de mélange Z constitue une mesure locale. Ce dernier est défini comme

$$\chi_Z = 2D|\nabla Z'|^2 \simeq \frac{1}{\tau_m} . \quad (2.7)$$

où τ_m est le temps caractéristique du mélange par diffusion. Le délai d'auto-inflammation est pris comme temps caractéristique chimique. On peut déduire que pour $1/\chi_Z$ moyenné sur tout le domaine très petit devant le délai d'auto-inflammation moyen, ce qui est équivalent à l'hypothèse $Da \ll 1$, le milieu est quasi-homogène en composition et l'auto-inflammation a lieu en masse dans le volume qui peut être assimilé à un réacteur homogène où seuls les détails cinétiques comptent. Dans un cas plus réaliste, les auteurs remarquent qu'il existe localement des zones où Da est de l'ordre de 1 et où les inhomogénéités de composition existent et affectent l'auto-allumage. Plus particulièrement, il est alors montré que le mode de combustion partiellement prémélangée contribue à la propagation du front de flamme juste après l'auto-inflammation, par les biais des flammes dites triples (*c.f.* figure 2.3). Leur structure s'explique comme suit. On suppose qu'il existe une zone de l'écoulement séparant l'oxydant et le combustible avec entre les deux une ligne stoechiométrique où la combustion s'amorce. Se forment alors deux branches réactives distinctes de part et d'autre de cette ligne ; elles correspondent à deux flammes de prémélange reliée par le point triple, l'une riche et l'autre pauvre. Les produits de combustion issus de la flamme de prémélange riche sont composés de combustible pur ($Z = 1$), l'oxydant ayant été entièrement consommé par la combustion. A l'inverse, les produits de combustion de la branche pauvre sont composés uniquement d'oxydant ($Z = 0$). Ainsi, entre ces deux flammes de prémélange (voir sous-section 4.4.4.1), oxydant pur et combustible pur diffusent-ils l'un vers l'autre, formant ainsi une flamme de diffusion (voir sous-section 4.4.4.2).

Le rôle central des flammes triples dans la propagation du front initié par auto-inflammation en laminaire ainsi qu'en turbulent dans un milieu partiellement prémélangé est démontré. Le mécanisme de propagation est illustré par la figure 2.4. L'intensité du taux de dissipation scalaire de Z varie le long de la ligne stoechiométrique. Si χ_Z est suffisamment faible ($\chi_Z < \chi_Z^e$, χ_Z^e correspondant à la valeur d'extinction), la diffusion est modérée et les processus chimiques peuvent se développer. Au niveau de la zone de l'écoulement où $\chi_Z \approx \chi_Z^e$ se propage un point triple où s'accroche une flamme triple. Les auteurs constatent également que le comportement de l'auto-inflammation est qualitativement similaire dans les écoulements turbulents 2D et 3D. Les flammes triples apparaissent ainsi comme des outils de modélisations potentiellement puissants.

En 1997, Mastorakos *et al.* [81] étudient l'auto-inflammation d'une couche de mélange bi-dimensionnelle, sans écoulement, paramétrée par son épaisseur initiale δ , puis immergée dans une turbulence homogène

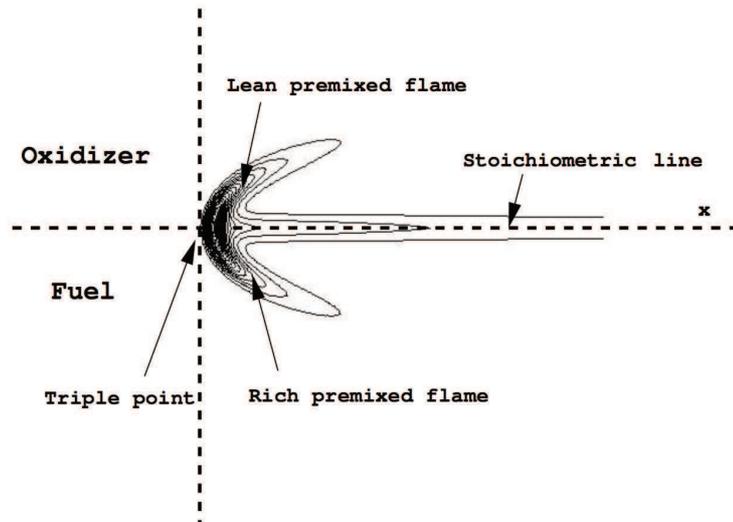


FIGURE 2.3 – Schéma de la structure d'une flamme triple extrait de [122], δm est la largeur de la zone de mélange.

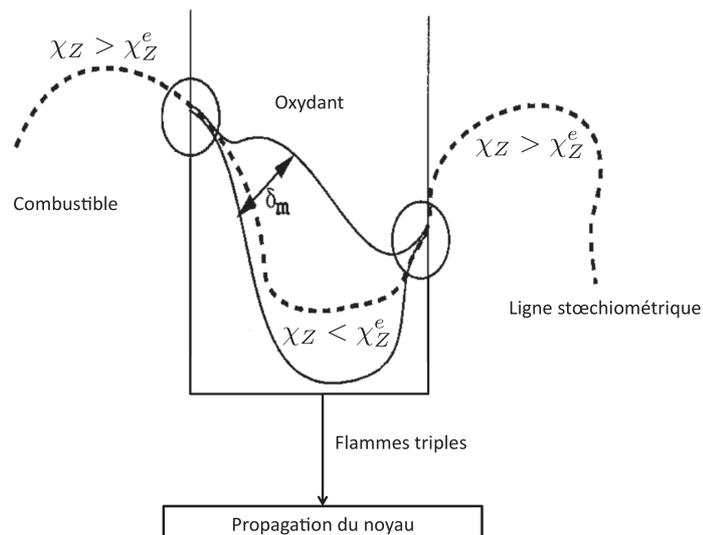


FIGURE 2.4 – Propagation du noyau d'auto-inflammation par l'intermédiaire des flammes triples dans un milieu partiellement prémélangé (extrait de [22])

et isotrope en décroissance. Des calculs de réacteurs homogènes menés dans une phase préliminaire servent de référence pour analyser les résultats DNS. Ici encore, les processus chimiques sont modélisés à l'aide d'un schéma à une étape. La turbulence est en décroissance. Elle est traitée comme un phénomène purement stochastique, c'est-à-dire que les champs turbulents initiaux sont obtenus synthétiquement en imposant initialement un spectre de turbulence homogène et isotrope par la prescription de l'énergie cinétique turbulente k , d'une longueur intégrale l_t et d'un temps intégral τ_t .

Dans un premiers temps, les auteurs déterminent la fraction de mélange minimisant le délai d'auto-inflammation τ_{ig}^{ref} d'un réacteur homogène à différentes températures initiales ; celle-ci est notée Z_{MR} . Ces température sont celles que l'on obtiendrait en se déplaçant à travers une couche de mélange inerte séparant du combustible à la température T_{fuel} ($Z_f = 1$ ou 0.5) et de l'oxydant à la température T_o ($Z_o = 0$), avec $T_o > T_f$. Z_{MR} est ensuite comparée à celle que l'on obtient dans la DNS de cette couche de mélange. Il est ainsi montré que plus la différence entre T_{fuel} et T_o est grande, plus Z_{MR} s'éloigne de Z_{st} , la fraction de mélange à la stœchiométrie, en se déplaçant du côté pauvre et donc chaud. Ces résultats sont cohérents avec les analyses asymptotiques à hautes températures d'activation menées par Liñan et Crespo [70] dans le cas laminaire et sont étendus ici au cas turbulent. Les auteurs remarquent les mêmes tendances dans les réponses des réacteurs homogènes, notant cependant une petite différence dans les valeurs induites par la prise en compte de la diffusion de la chaleur qui augmente légèrement Z_{MR} .

L'impact de la turbulence sur la variabilité du délai d'auto-inflammation est également étudié. Il apparaît ainsi que cette variabilité est deux fois plus forte dans le cas où $\tau_{ig} > \tau_t$ que dans le cas inverse, les phénomènes de transport diffusifs laminaires et turbulents pouvant perturber plus significativement les processus chimiques. Leur impact est donc très important. Il est cependant noté que pour des paramètres initiaux de la couche de mélange fixés, τ_{ig} était indépendant de τ_t . En d'autres termes, la turbulence n'affecte pas la valeur moyenne du délai d'auto-inflammation, mais a un fort impact sur sa variance. En outre, il est montré que le délai d'auto-inflammation obtenu dans le cas turbulent est inférieur à celui obtenu dans le cas laminaire. En effet, le mélange turbulent a pour effet d'amortir plus rapidement les fluctuations de température ainsi que de composition, qui retardent l'auto-allumage par les phénomènes diffusifs qu'elles induisent. La turbulence a donc pour effet de créer plus rapidement des poches bien mélangées favorisant l'initiation de l'auto-inflammation. Cet impact avait déjà été souligné en 1992 par Fedotov [32] dans le cas d'un milieu homogène en composition, mais présentant des fluctuations aléatoires de température, vues dans le contexte de cette études comme des pertes thermiques. Il avait remarqué que, dans certaines situations où l'auto-inflammation se produit effectivement, un modèle ne prenant en compte que la valeur moyenne de ces pertes thermiques pouvait laisser l'écoulement quasiment inerte.

Finalement, les volumes fluides les plus réactifs de l'écoulement vérifient la propriété

$$\tau_{ig}^{MR} = \tau_{ig} (\min(\chi_Z(\mathbf{x}, t)) | Z_{MR}) , \quad (2.8)$$

où τ_{ig}^{MR} est donc la plus petite valeur du délai d'auto-inflammation que l'on peut attendre dans le domaine. Logiquement, les auteurs concluent que la dépendance du délai d'auto-inflammation au taux de dissipation scalaire conditionné, beaucoup plus qu'à celle du temps intégral τ_t , doit être modéliser de façon précise pour représenter correctement l'auto-inflammation dans un milieu présentant des inhomogénéités de composition et de température. Ils ajoutent que la modélisation des fluctuations est de toute première importance, remettant ainsi en question l'utilisation d'un seul temps de mélange dans les méthodes de pdf (Correa et Dean [18]) ainsi que l'utilisation de la moyenne d'ensemble uniquement pour prendre en compte l'effet du taux de dissipation scalaire dans les modèles de flammelettes (Zhang *et al.* [134]).

En vertu des précédentes conclusions, Mastorakos *et al.* [83] proposent la même année un modèle permettant d'inclure l'effet des fluctuations de $\chi_Z | Z_{MR}$, dans le formalisme Conditional Moment Clo-

sure [4, 64]. Deux équations de transport supplémentaires obtenues suite à une décomposition de Reynolds et un développement en série à l'ordre deux de l'équation de transport de la température en low Mach sont introduites. L'une décrit l'évolution temporelle de la valeur moyenne de l'incrément de la température par rapport à sa valeur initiale (*i.e.* sans réaction) et l'autre, la variance de cet incrément. Les termes de corrélation double et triple apparaissant dans ces équations sont fermés via le post-traitement des données de nombreuses simulations DNS 2D. Pour éprouver le comportement du modèle, une étude paramétrique basée sur des calculs RANS d'un jet de combustible froid dans de l'air chaud dans des conditions thermodynamiques typiques d'un moteur Diesel en charge moyenne est effectuée. Il est montré que le modèle reproduit correctement les tendances attendues ou observées expérimentalement en termes de délai et de localisation de l'auto-inflammation lorsqu'on fait varier les paramètres du jet. Les auteurs concluent sur la nécessité de développer un modèle de fermeture plus précis pour la moyenne et la variance du taux de dissipation scalaire conditionné. C'est l'objet des travaux de Mastorakos et Bilger en 1998 [82].

Dans [81] et [83], l'attention est portée principalement sur l'impact des fluctuations du taux de dissipation scalaire conditionné sur le délai d'auto-inflammation et plus généralement, sur la phase d'initiation de l'auto-allumage durant laquelle les températures restent faibles et les temps chimiques grands. Cependant, la phase de combustion caractérisée par de hautes températures et un nombre de Damköhler beaucoup plus élevé n'est pas encore considéré. Du point de vue de la modélisation, cette différence importante dans les échelles de temps amène à des hypothèses différentes impliquant la nécessité d'introduire des sous-modèles qu'il faut coupler de manière à représenter la transition de manière pertinente. C'est un problème majeur qui est en général abordé en introduisant des température seuil ou des nombres de Damköhler de transition. Cette démarche donne globalement des informations intéressantes d'un point de vue qualitatif, mais les prédictions quantitatives restent trop approximatives.

Toujours en utilisant un schéma cinétique à une étape, Pires Da Cruz *et al.* [102] proposent un modèle hybride pour le calcul des termes source moyens incluant les ingrédients suivants :

- une description de l'initiation de l'auto-inflammation se concentrant sur les phénomènes ayant lieu à basses températures :
c'est la partie dite PDFa (pour Probability Density Function Autoignition) du modèle. Classiquement, la pdf la fraction de mélange Z (richesse) est présumée, une fonction β étant supposée décrire cette distribution. La variable d'avancement c est simplement supposée homogène dans la maille ;
- une description de la combustion établie dédiée aux phénomènes à hautes températures : cette composante du modèle est appelée CHI. Un modèle de type flammelettes moyennée [129] est utilisé pour modéliser les termes sources moyens.
- une fonction de transition permettant de passer continûment d'une description à l'autre d'une manière aussi représentative que possible, assure le couplage. Plusieurs formes sont testées pour cette fonction.

Le modèle est implanté dans un code CFD et testé en 2D dans une configuration de type jet. De bonnes tendances sont obtenues : l'impact du mélange turbulent sur les termes sources est correctement pris en compte par le modèle. En particulier, la diminution du délai d'auto-inflammation suite à l'augmentation de l'énergie cinétique turbulente est observé numériquement.

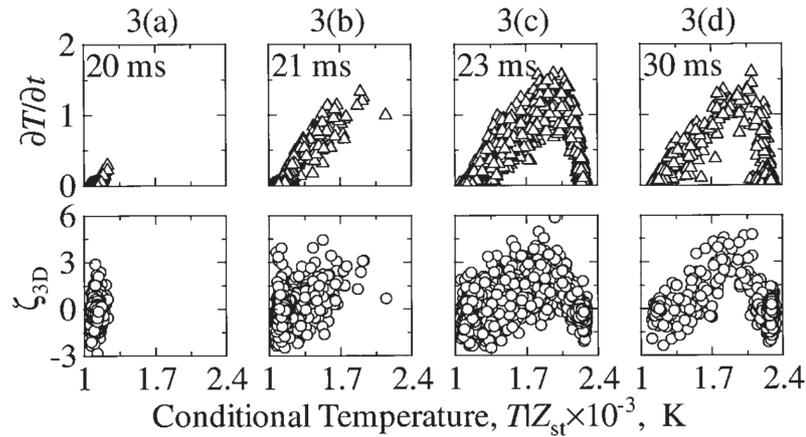
En 2000 [109] et en 2002 [110], Sreedhara et Lakshmisha étudient l'auto-allumage dans une turbulence homogène et isotrope 3D en décroissance, des poches de combustible étant initialement distribuées aléatoirement dans un environnement constitué d'air chaud. Le schéma cinétique utilisé dans cette DNS [89] est constitué de cinq étapes impliquant cinq espèces et est conçu pour décrire la combustion du *n*-heptane dans l'air à des pressions de l'ordre de 40 bars. Les coefficients de ce schéma sont ici diminués d'un facteur 30 pour assurer que la résolution du maillage est suffisante et que le délai d'auto-inflammation n'est pas trop élevé. Cependant, compte-tenu des résultats présentés dans ces travaux, la prise en compte d'un schéma cinétique plus représentatif qu'un schéma à une étape ne semble pas apporter d'informations essentielles. Les observations faites en 2D dans [81] restent valables, le taux de dissipation scalaire conditionné à la fraction de mélange la plus réactive apparaissant encore comme un traceur des sites privilégiés de l'auto-inflammation. Les auteurs montrent l'importance de l'effet cyclostrophique sur la dynamique de l'auto-allumage : à cause de la variation de masse volumique induite par la dilatation, les gaz s'auto-inflamment se déplacent vers centre de structures turbulentes caractérisé par critère Q (noté ζ_{3D} sur la figure 2.5) élevé, comme illustré sur la figure 2.5(a). Dans les simulations à masse volumique constante, ce comportement particulier n'est naturellement pas observé, comme l'atteste la figure 2.5(b).

La diminution du délai d'auto-inflammation accompagnant l'augmentation de l'énergie cinétique turbulente favorisant le mélange est également observée dans ces simulations 3D. En plus de confirmer les observations faites dans [81], Sreedhara et Lakshmisha montrent que :

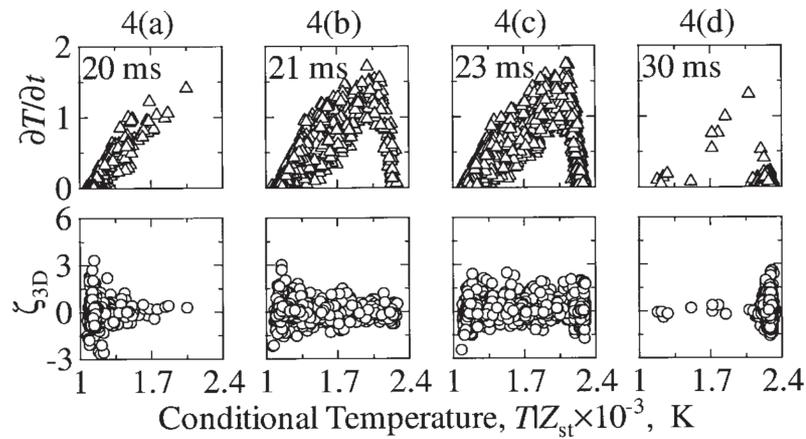
- le délai d'auto-inflammation est indépendant de l'intensité turbulente initiale quand l'échelle spatiale propre au scalaire est petite devant celle propre au champ de vitesse. Dans ces conditions en effet, du point de vue des poches de combustible, l'écoulement est laminaire et seule la diffusion laminaire assure le mélange. En d'autres termes la topologie des poches de combustible est indépendante de celle du champ de vitesse et de l'énergie cinétique turbulente associée ;
- le délai d'auto-inflammation est plus élevé dans le cas 2D que dans le cas 3D, puisque l'étirement 3D favorise le mélange nécessaire à la formation de poches où χ_Z est faible ;
- en 3D, les auteurs observent une diminution du délai d'auto-inflammation avec l'augmentation de l'énergie cinétique turbulente initiale ; la tendance inverse est observée en 2D. Cette différence est encore expliquée par l'étirement 3D qui domine sur la dissipation visqueuse dans les tous premiers instants.

L'observation selon laquelle, en 2D, le délai d'auto-inflammation augmente avec le niveau de turbulence paraît contradictoire avec celle faite dans [81], où les auteurs remarquent qu'un écoulement réactif turbulent présentant des inhomogénéités de composition s'auto-inflamme plus rapidement qu'un écoulement laminaire. Cette différence de comportement doit nécessairement être liée à une différence d'initialisation du champ scalaire. Dans une configuration de type couche de mélange, la transition spatiale entre l'air et combustible est contrôlée par la prescription de l'épaisseur caractéristique initiale δ ; la pdf à deux pics utilisée pour initialiser le champ de Z dans [109] et [110] implique quasiment un saut entre les poches de combustible et l'environnement composé d'air. Les interactions entre la turbulence et les interfaces ont donc lieu sur des temps caractéristiques différents dans les deux études.

Plus tard, en concomitance avec l'augmentation des puissances de calcul, la communauté a pu aborder l'interaction entre la turbulence et la structure chimique fine des noyaux d'auto-inflammation.



(a) DNS à masse volumique variable



(b) DNS à masse volumique constante

FIGURE 2.5 – Scatter plots à différents instants durant l'auto-allumage extraits de [110]. Dérivée eulérienne de la température et critère Q (noté ζ_{3D}) v.s. la température conditionnée à la stœchiométrie.

Etude du couplage turbulence/structure chimique réaliste

En 2003, Echehki et Chen [28] ouvrent la voie des simulations numériques directes avec prise en compte des détails d'une cinétique chimique complexe. Même si ces études restent confinées à des cas 2D, elles permettent une compréhension des interactions entre tous les processus physico-chimiques à l'oeuvre. Les auteurs effectuent des DNS de l'auto-inflammation d'un mélange H_2 /air inhomogène. Les champs turbulents initiaux sont construits en prescrivant un spectre synthétique. En accord avec les résultats obtenus en chimie simple par Mastorakos *et al.* [81], les auteurs remarquent que les sites privilégiés par l'auto-inflammation montrent des niveaux de taux de dissipation scalaire faibles et une composition pauvre. Cependant, les auteurs montrent également que l'évolution des noyaux d'auto-inflammation est fortement impactée par le couplage entre le mécanisme chimique responsable de la création des radicaux et les phénomènes de diffusion différentielle. Ils remarquent que les nombres de Damköhler, basés sur les contributions relatives de la diffusion et de la chimie dans les équations de transport de l'énergie et des espèces, évoluent significativement durant le processus d'auto-inflammation. Les auteurs concluent donc que, sous cette forme, une unique mesure de la compétition entre la chimie et le transport n'est pas suffisante. Pour décrire globalement la dynamique de l'auto-inflammation, ils pro-

posent de suivre l'évolution temporelle du nombre de Damköhler associé à une espèce représentative de l'auto-inflammation d'un mélange H_2 /air, le radical H, en plus de celle du nombre de Damköhler associé aux pertes thermiques. La condition $Da_H > 1$ doit être vérifiée tout le temps pour que l'auto-allumage ait lieu ; sinon, la diffusion différentielle de H diminue sa concentration locale plus rapidement que la production par la chimie ne l'augmente, ce qui se traduit par une extinction.

Dans [12], Chen *et al.* mènent des simulations numériques directes 2D de l'auto-inflammation à volume constant d'un prémélange H_2 /air pauvre présentant initialement des inhomogénéités de températures. Ici encore, les champs turbulents sont obtenus à partir de spectre synthétiques. Le principal objectif de cette étude est d'appréhender le plus finement possible les mécanismes à l'oeuvre dans les moteurs de type CAI/HCCI. Ici, la théorie de Zel'dovich est validée dans le cas d'une chimie complexe et les auteurs proposent d'introduire un paramètre adimensionnel rendant compte de la transition entre les régimes d'auto-allumage pilotés par la diffusion, et donc déflagratif, et ceux pilotés par la chimie, nommés régimes d'auto-inflammation spontanée. En s'inspirant de la classification proposée par Zel'dovich dans [133], les auteurs identifient ce paramètre au ratio entre la vitesse de déplacement du point de vue des gaz frais, et, la vitesse de flamme laminaire. La diffusion a ici pour effet de diminuer la vitesse de déplacement, donc la valeur de ce paramètre adimensionnel et de favoriser ainsi l'auto-inflammation en régime déflagratif. D'un autre côté, il est également remarqué que la diffusion dissipe les gradients initiaux de température, favorisant ainsi le régimes d'auto-inflammation spontané, l'importance de cet effet pouvant être mesurée par un nombre de Damköhler défini classiquement comme le rapport entre un temps de mélange turbulent sur le délai d'auto-inflammation. Les simulations numériques sont ensuite analysées à l'aide de ces deux nombres sans dimension. Les auteurs montrent que pour le cas physique considéré, le régime d'auto-inflammation est hybride, avec des gaz brûlés produit majoritairement par propagation spontanée à cause sa vitesse bien supérieure à celle de la propagation déflagrative. Dans certaines zones de l'écoulement où la richesse est faible, la vitesse de flamme laminaire est nulle, aucune propagation pilotée par la diffusion n'étant possible, la combustion est assurée uniquement par propagation spontanée.

Dans la section suivante, une synthèse des travaux dédiés à la compréhension et à la modélisation de l'auto-inflammation dans les moteurs de type CAI/HCCI est présentée.

2.3 L'auto-inflammation dans un milieu homogène en composition - La technologie HCCI/CAI

2.3.1 Introduction

Pour les moteurs à essence classiques, le phénomène d'auto-inflammation est critique et on souhaite particulièrement l'éviter. A l'inverse, dans les futures génération de moteurs, on pourrait bien mettre ce phénomène à contribution pour tirer profit des avantages qu'il offre au niveau de la combustion. Que le carburant soit composé d'un mélange d'air et diesel (HCCI) ou d'essence (CAI), l'idée est la même : on cherche à provoquer l'auto-allumage en masse du mélange réactif pauvre voire stœchiométrique, qui est donc théoriquement homogène du point de vue des quantités thermo-chimiques. En HCCI, l'auto-inflammation est obtenue uniquement par compression volumétrique responsable de l'augmentation de la température et de la pression. En CAI, en plus de la compression du mélange par le piston, on ex-

ploite l'enthalpie contenue dans les gaz brûlés retenus dans le cylindre par l'ajustement précis du temps d'ouverture des soupapes, de manière à provoquer l'auto-inflammation pour des rapports de compression proches de ceux utilisés actuellement dans les moteurs à essence ($\approx 13 : 1$). Dans la pratique, un prémélange parfait ne peut pas être obtenu et des inhomogénéités subsistent. La terminologie « combustion homogène » désigne donc plutôt un régime dans lequel on souhaite que le mélange s'initie en de multiples points du volume comprimé en évitant, dans la mesure du possible, les régimes propagatifs ou diffusifs responsables de hauts niveaux de température et donc de la formation de NO_x . L'image 2.6 montre la nature de la combustion associée aux différentes technologies de moteur.

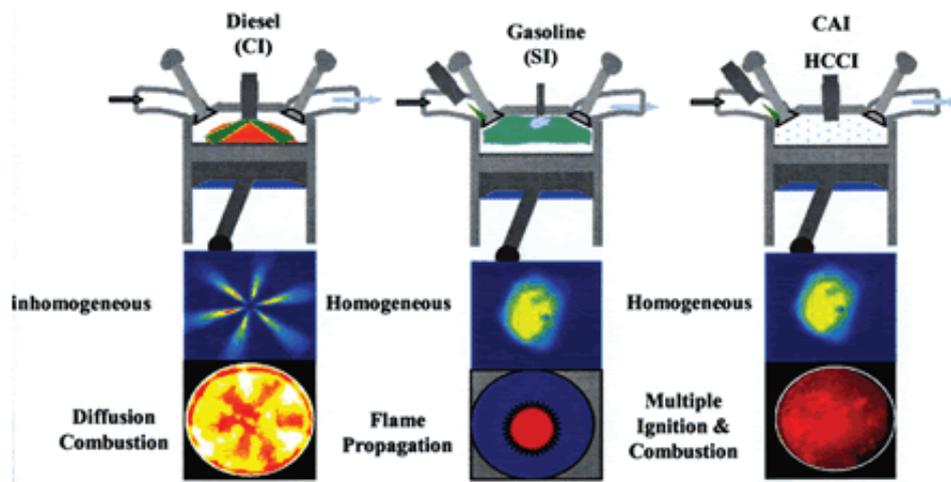


FIGURE 2.6 – Topologies des zones de réaction associées aux moteurs à combustion interne. A gauche, moteur à allumage par compression (CI) ; au centre, moteur à allumage commandé (SI) ; à droite, moteur HCCI ou CAI. Source : site de l'Université de Brunel à Londres, www.brunel.ac.uk/sed/mecheng/research/ee/capf/cai.

Dans les moteurs conventionnels, la combustion est contrôlée, soit par l'injection dans le cas du moteur Diesel, soit par la bougie dans le cas du moteur essence. Aucune de ces deux solutions n'est envisageable dans les moteurs CAI/HCCI, pour lesquels le contrôle de la combustion apparaît comme l'enjeu principal.

Pour optimiser le fonctionnement de ce type de moteurs, l'auto-inflammation doit avoir lieu au voisinage du PMH. Une initiation trop prématurée ou trop tardive de la combustion signifie une dégradation du rendement thermique et peut être dangereuse pour l'intégrité du moteur. Pour un fonctionnement en charge réduite, le rapport volumétrique de l'ordre de $13 : 1$ permet de satisfaire cette contrainte. Néanmoins, pour un fonctionnement à des charges plus élevées, une stratégie de contrôle de l'auto-allumage doit être mise en oeuvre. La variation du rapport volumétrique apparaît comme une solution envisageable, par la réactivité importante qu'elle permet. Cependant, le réglage dynamique du rapport volumétrique est difficile. Une autre solution envisagée réside dans le contrôle du délai d'auto-inflammation par dilution ; elle permet de ralentir la combustion afin de la synchroniser avec le mouvement des pistons. Deux types d'additifs peuvent être utilisés :

- l'ajout d'air permet de diminuer la richesse et donc d'augmenter le délai d'auto-inflammation² ;
- l'ajout d'un gaz inerte chimiquement, mais actif d'un point de vue thermodynamique, comme le CO₂, permet de pomper de l'énergie thermique au gaz réactif.

Cependant, ces deux solutions aboutissent toutes deux à la formation de CO résultant d'une combustion incomplète ; en toute logique, ces émissions sont d'autant plus fortes que le régime est élevé, et donc, que le temps de séjour du gaz réactif dans le cylindre, correspondant au temps disponible pour réaliser la combustion, est faible. Le contrôle de la combustion CAI/HCCI sur toute la plage de régimes présente donc encore des difficultés. Une stratégie d'« hybridation » des modes de combustion reste envisageable et prometteuse mais une compréhension plus fondamentale des mécanismes en jeu dans la combustion homogène est nécessaire.

Pour étudier l'auto-inflammation en mode CAI/HCCI, les expérimentateurs doivent faire face à des configurations de type moteur à combustion interne réels dans lesquels il n'est plus possible, contrairement à la DNS, de dissocier artificiellement tous les phénomènes. Néanmoins, des études de sensibilité peuvent être menées afin de dégager les principaux paramètres influençant la combustion en régime CAI/HCCI. Pour affiner ces études, il est possible de contourner certaines difficultés et certains biais imposés par les mesures sur moteur, en ayant recours aux machines à compression rapide (MCR). Des résultats de ces études expérimentales seront exposés dans la sous-section suivante. On y présentera également certaines caractéristiques de la MCR qui a donné lieu aux études numériques présentées dans le chapitre 5. Enfin, le coût prohibitif de la simulation numérique directe écartant toute possibilité d'analyses de sensibilité par son biais, d'autres stratégies incluant des modèles ont donc été imaginées ; on décrira leurs principes ainsi que les informations qu'elles ont permis d'extraire.

2.3.2 Etude expérimentale

2.3.2.1 Sur moteurs

Comme souligné dans l'introduction générale de ce manuscrit (*c.f.* chapitre 1), les premières études expérimentales dédiées aux moteurs CAI/HCCI remontent à 1979. Onishi *et al.* [97] montrent notamment que l'auto-inflammation dans ce type de moteur consomme le gaz frais en masse, sans front de flamme déflagratif. L'acronyme HCCI est introduit plus tard par Thring [118] qui étudie l'auto-inflammation de l'essence. Il souligne l'importance toute particulière de la température d'admission sur l'auto-inflammation en régime HCCI et conclut sur la nécessité de préchauffer les gaz d'admission à des températures supérieures à 640K. Il observe également que la combustion homogène par compression n'est pas exploitable à faible charge et à faible régime. L'idée d'un moteur autorisant alternativement la combustion par allumage commandé et par compression est alors proposée.

Une comparaison des rendements sur un même moteur monocylindre quatre temps fonctionnant soit en allumage commandé, soit en HCCI, est réalisée en 1997 par Christensen *et al.* [15] pour trois carburants différents (iso-octane, éthanol et gaz naturel). L'absence de papillon sur la ligne d'admission en mode HCCI permet de diminuer les pertes par pompage et d'augmenter le rendement. Les quantités de NO_x sont également réduites. Néanmoins, les auteurs montrent que la combustion en mode HCCI est plus sensible aux phénomènes d'extinction au voisinage de la paroi, ce qui induit des niveaux plus élevés

2. Pour une richesse inférieure à 1, le délai d'auto-inflammation augmente quand la richesse diminue.

d'émissions de HC imbrûlés. Sur le même moteur et pour les mêmes carburants, Christensen *et al.* [14] étudient l'impact du rapport volumétrique, de la pression à l'admission et de la charge, sur le rendement et le niveau des émissions polluantes :

- le rendement de combustion augmente avec la pression d'admission, même si le rendement global du moteur reste inchangé ;
- les émissions de HC diminuent avec l'augmentation de la pression à l'admission et de la charge ;
- les émissions de CO sont très faibles, même pour un fonctionnement proche de la limite riche.

Des recherches expérimentales ont également été dédiées à la compréhension de la cinématique de l'auto-inflammation dans les moteurs HCCI. Ainsi, Lavy *et al.* [68] montrent une visualisation directe de la combustion dans un moteur monocylindre deux temps HCCI (*c.f.* image 2.7) par diffusion de Mie. Plusieurs sites d'auto-inflammation peuvent être identifiés ; ils sont distribués aléatoirement dans le volume. Au maximum, cinq sites d'auto-inflammation sont visualisés simultanément et la struc-

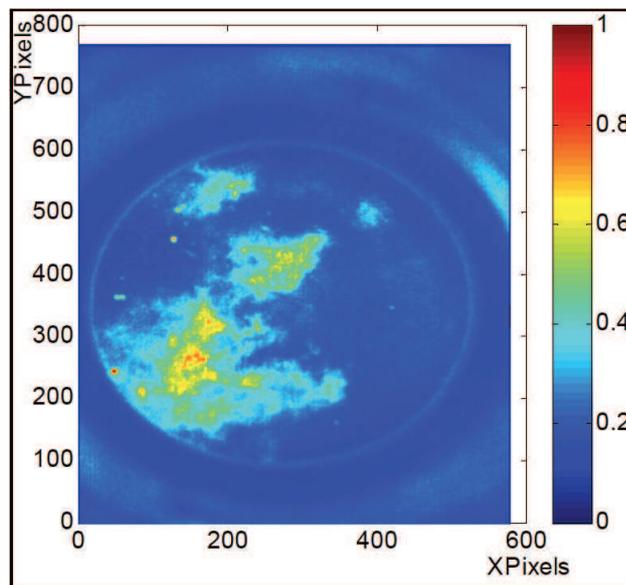


FIGURE 2.7 – Visualisation directe des différents sites d'auto-inflammation, Lavy *et al.* [68]

ture de front de flamme n'apparaît pas sur la visualisation. Guibert *et al.* [49, 111] suggèrent l'idée que la combustion se développe par auto-inflammation séquentielle et en masse de poches de gaz réactifs. Hultqvist *et al.* [53] utilisent la technique PLIF (Planar Laser Induced Fluorescence) combinée à de l'imagerie instantanée par chimiluminescence sur un moteur monocylindre quatre temps. La concentration du radical OH est alors accessible, ce qui permet aux auteurs de visualiser différents sites d'auto-inflammation se dilatant en augmentant la température des gaz frais par compression, ce qui a pour effet d'accélérer l'auto-inflammation de ces poches. Cette observation est consistante avec le mécanisme proposé dans [49, 111]. En outre, à l'instant où une poche s'auto-inflamme, les auteurs estiment la vitesse de propagation du front à 82 m/s ; elle est donc très largement supérieure à la vitesse de déflagration mesurée dans un moteur à allumage commandé. Les auteurs apportent ainsi une preuve expérimentale que dans la combustion HCCI, la consommation des gaz frais ne peut pas être expliquée par la propagation déflagrative d'un front de flamme de prémélange. Ils observent également que la vitesse de progression d'une poche auto-inflammée est d'environ 15 m/s, ce qui peut être la signature d'une propagation pilotée par diffusion. Hultqvist *et al.* concluent que des régimes propagatifs de natures différentes pourraient

contribuer simultanément à la consommation de la charge homogène dans un moteur HCCI.

Pour aller plus loin dans l'analyse de la combustion dans un moteur CAI/HCCI, les différents phénomènes impliqués lors de la combustion par auto-inflammation en charge homogène doivent être dissociés pour faciliter leur compréhension et discerner leurs influences respectives. Les machines à compression rapide (MCR) apparaissent comme des outils d'investigation particulièrement adaptés. Dans la section suivante, on exposera dans ses grandes lignes le principe des MCR et on présentera plus particulièrement celle conçue à l'Université Pierre et Marie Curie (UPMC). En effet, elle sera l'objet, dans cette thèse, de simulations numériques directes qui seront présentées dans le chapitre 5.

2.3.2.2 Les machines à compression rapide

De l'utilité des MCR

Les machines à compression rapide sont conçues pour porter un mélange à une température et une pression permettant son auto-inflammation dans une chambre de combustion. Le mélange est comprimé par un piston qui est arrêté rapidement en fin de course et bloqué dans cette position pour éviter les phénomènes de rebond. Ces machines sont généralement utilisées pour mesurer le délai d'auto-inflammation d'un mélange. Le temps de compression doit donc être suffisamment court pour que les processus chimiques n'aient pas le temps de s'initier avant le point mort haut. En les associant à des techniques de diagnostic permettant l'identification d'espèces chimiques, les MCR peuvent également contribuer à l'obtention de données nécessaires à l'élaboration et à la validation de schémas cinétiques. Dans ce cas, afin de garantir la reproductibilité des mesures d'une MCR à l'autre, on doit être sûr que la contribution des phénomènes de transport est négligeable devant la chimie. En d'autres termes, pour ces applications, il est nécessaire qu'une partie du volume fluide ne soit pas affectée par les pertes thermiques aux parois. Cette zone de l'écoulement doit donc se comporter comme un réacteur homogène adiabatique et est appelée « coeur adiabatique ».

Dans [86], Minetti *et al.* étudient le comportement d'un mélange *n*-heptane/air suite à une compression rapide. Les auteurs montrent notamment qu'en fonction des conditions thermo-chimiques, l'auto-inflammation peut avoir lieu en deux étapes (flamme froide et flamme principale) ou en une étape (flamme principale) si la température du mélange au point mort haut est supérieure à 800 K. Ils montrent également que, de manière contre-intuitive, les délais d'auto-inflammation augmentent entre 700 et 860 K, quelle que soit la pression entre 3 et 40 Bar. Les auteurs peuvent ainsi valider un mécanisme cinétique qui prédit correctement ces délais. Cependant, ils observent que l'évolution du *n*-heptane est mal représentée avant l'auto-inflammation. Une autre étude sur MCR a également permis à Tanaka *et al.* [115] d'étendre à toutes les températures un mécanisme cinétique dédié aux carburants de référence proposé par Hu et Keck [52] qui n'incluait que la description précise des réactions à basses températures. He *et al.* [51] proposent une corrélation permettant de relier le délai d'auto-inflammation de l'iso-octane à la richesse, à la pression, à la température et à la proportion molaire du dioxygène, grâce à des mesures effectuées sur MCR.

La MCR de l'Institut Jean Le Rond d'Alembert de l'UPMC

Les MCR peuvent également être vues comme des configurations permettant de simuler une seule compression d'un moteur à combustion interne. Elles peuvent ainsi être utilisées pour étudier les mécanis-

mes à l'oeuvre dans l'auto-inflammation en régime HCCI dans des conditions se prêtant plus facilement aux techniques de diagnostic. Les MCR s'avèrent être des outils particulièrement adaptés à l'étude de sensibilité de la cinétique chimique aux différents paramètres influents dans ce mode de combustion. En effet, la maîtrise des conditions thermodynamiques est bien plus aisée que dans un moteur réel grâce à des choix de conception qui ne sont pas contraints par des limites d'encombrement. Dans ce cas, plutôt que d'éviter les phénomènes de transport dans la chambre de combustion, on peut proposer des moyens de contrôler la turbulence afin d'étudier son impact sur l'initiation et le développement de l'auto-inflammation en mode CAI/HCCI. C'est la stratégie adoptée par Guibert *et al.* [47, 48].

Une grille placée à l'entrée de la chambre de combustion permet de contrôler les propriétés statistiques de la turbulence injectée et d'étudier les mécanismes de couplage entre l'aérodynamique et la thermochimie. Une coupe longitudinale de cette MCR est présentée sur la figure 2.8. Elle est extraite du manuscrit de thèse de Keromnes [61].

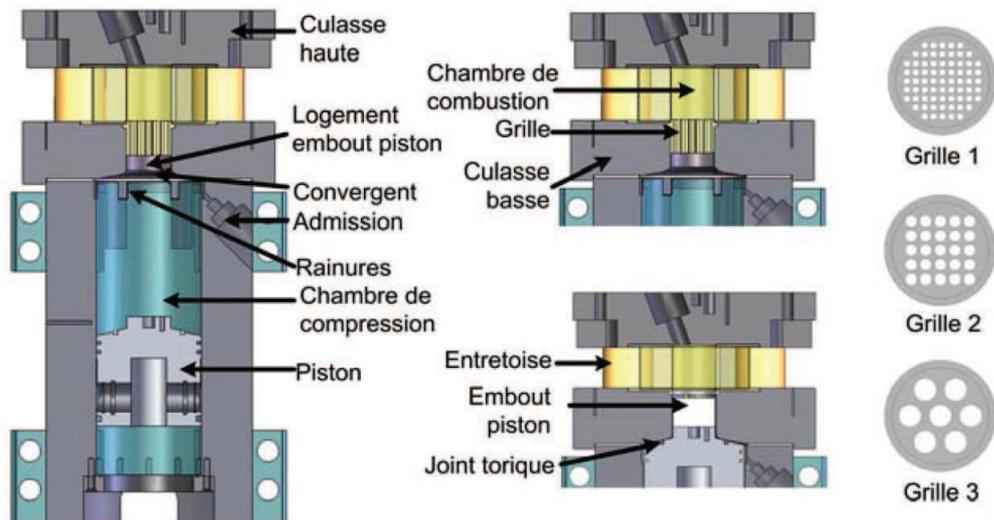


FIGURE 2.8 – Coupe longitudinale de la MCR du l'UPMC, rapport de thèse de Keromnes [61]

Sans entrer dans les détails, cette MCR est principalement composée d'une chambre de compression dans laquelle se déplace un piston qui est mis en mouvement par un vérin hydraulique et qui comprime le mélange, et d'une chambre de combustion. De nombreuses précautions dans la conception ont été prises de manière à assurer la reproductibilité de cette machine pour pouvoir mener des études paramétriques (*c.f.* [61]). Trois grilles de 5 mm d'épaisseur sont disponibles et permettent d'étudier la sensibilité du milieu réactionnel aux paramètres turbulents. La grille 1 comporte 69 trous de 3.5 mm de diamètre, la grille 2, 25 trous de 9.5 mm et la 3, 6 trous de 12.5 mm.

Des mesures temporelles de pression sont disponibles. Cependant, l'étude de la combustion CAI/HCCI et des détails fins des interactions turbulence/thermochimie ne peut pas être menée uniquement par l'intermédiaire d'un simple signal de pression moyennée dans toute la chambre de combustion. Un accès optique à la chambre de combustion équipe donc la MCR de l'Université Pierre et Marie Curie et

permet un champ d'observation de $40 \times 40 \text{ mm}^2$. Deux techniques de diagnostic optique peuvent ainsi être mise en oeuvre, la PIV (Particle image velocimetry) permettant l'étude de l'aérodynamique interne, et la chimiluminescence permettant une visualisation directe des zones de réaction.

2.3.3 Etudes numériques et modélisation

2.3.3.1 Approches spécifiques : les modèles multi-zones

L'idée principale des modèles multi-zones est d'intégrer numériquement la chimie sur un maillage de dimension bien inférieure à celui sur lequel l'écoulement est résolu, pour des raisons évidentes d'économie de temps de calcul. Chaque maille « chimique » correspond en fait à une zone entière de l'écoulement dans laquelle les grandeurs thermo-chimiques sont supposées parfaitement homogènes. La clef de voûte de ce modèle réside dans la détermination d'un mapping pertinent entre les deux maillages. Dans les paragraphes qui suivent, on montrera les possibilités offertes par le modèle multi-zones dans la modélisation de la combustion CAI/HCCI en présentant les principaux résultats de travaux publiés. Le problème du mapping ne sera pas abordé dans ses détails. Le lecteur intéressé pourra trouver les informations techniques dans les publications présentées ci-après. Simplement pour se représenter le problème, la figure 2.9 [66] illustre la décomposition de la chambre de combustion en zones. Chaque zone correspond à une portion continue de la chambre de combustion, l'union de toutes les zones recouvrant tout le volume d'étude.

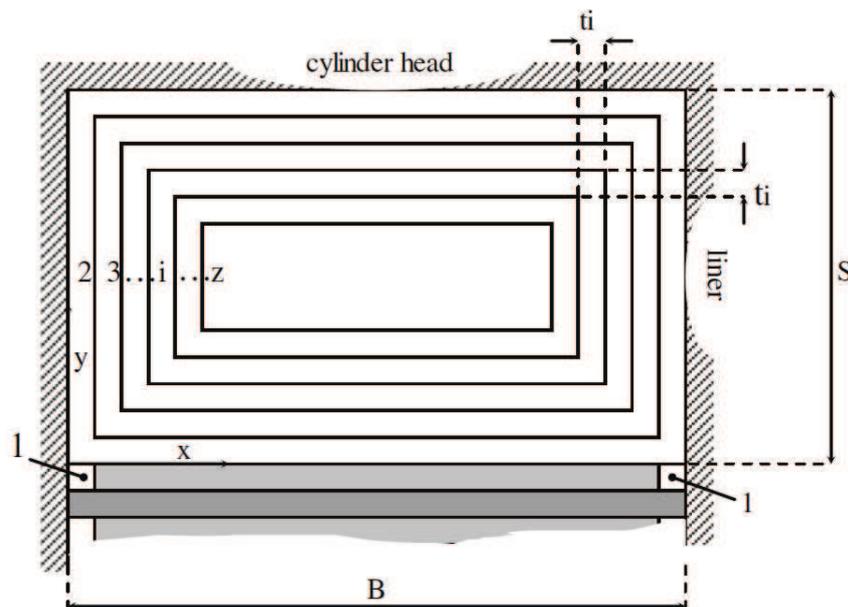


FIGURE 2.9 – Configuration géométrique du modèle multi-zone, Komninos *et al.* [66]

Dans la famille des modèles multi-zones, l'approche la plus simpliste consiste à assimiler l'ensemble du domaine à une seule et unique zone. Les champs thermo-chimiques dans le volume de combustion sont donc considérés comme homogènes, sans prise en compte des phénomènes de transport tridimensionnels. Seule la dimension temporelle est donc prise en compte dans cette approche dite « 0D ». La configuration canonique du réacteur homogène (*c.f.* § 4.4.4.3) est alors utilisée pour modéliser l'évolution d'un tel système. L'intérêt évident de cette approche réside dans son faible coût numérique : elle peut permettre

de mener rapidement une première étude de sensibilité de la cinétique chimique aux conditions initiales ou encore au rapport de compression. De plus, en restant dans cette formulation 0D, il est également possible de modéliser l'effet d'éventuelles pertes thermiques aux parois en ramenant leur contribution tridimensionnelle en un point de l'espace, via des corrélations. Cette stratégie de modélisation permet, par exemple, à Flowers *et al.* [38] d'étudier l'impact de la composition d'un gaz naturel sur la combustion dans un moteur de type CAI/HCCI et d'explorer trois stratégies de contrôle : l'addition de diméthyléther (C_2H_6O), la température de l'air à l'admission et le recyclage des gaz d'échappement chauds ou EGR (Exhaust Gas Recirculation). L'effet de l'EGR sur la combustion CAI/HCCI dans un moteur alimenté en méthane est étudié par Chen et Milovanovic [13] qui adoptent également une approche 0D. Les auteurs ont ainsi pu montrer que l'enthalpie contenue dans les gaz d'échappement est essentielle à l'initiation de l'auto-inflammation ; ils ont aussi pu observer les effets chimiques des EGR et remarquer que les espèces qui les composent peuvent avoir des contributions opposées sur le délai d'auto-inflammation ainsi que sur le taux de dégagement de chaleur.

Des modèles de transferts thermiques aux parois sont utilisés pour des simulations 0D de moteurs CAI/HCCI. Cependant, à l'image de la corrélation de Woschni [130], ils sont généralement basés sur des relations empiriques obtenues par post-traitement de mesures effectuées sur un moteur diesel à injection directe. En outre, il est évident qu'une approche négligeant la dynamique propre à l'écoulement étudié ne rendra compte que très schématiquement des pertes thermiques aux parois. Compte-tenu de l'importance capitale de la distribution de la température sur le développement de l'auto-inflammation (*c.f.* section 2.2.3.2), les biais ainsi introduits se répercutent sur l'ensemble des propriétés thermo-chimiques. En outre, selon l'hypothèse d'homogénéité parfaite, l'auto-inflammation est réalisée simultanément partout dans le volume de la chambre de combustion et les évolutions de température et de pression correspondantes s'écartent donc significativement de la réalité. Ceci compromet toute tentative de prédiction sur les espèces et sur la durée de combustion qui est largement sous-estimée, la combustion étant rendue artificiellement robuste. Il est néanmoins possible de raffiner cette modélisation en introduisant une formulation plus générale, tout en continuant d'exploiter la configuration du réacteur homogène pour sa simplicité et le faible coût numérique que sa résolution nécessite.

Une description plus physique de la combustion CAI/HCCI doit intégrer une prise en compte du transport turbulent. Une approche basée sur un réseau de réacteurs homogènes a été proposée dans sa version la plus simple par Fiveland et Assanis [36] afin de rendre compte spatialement du transfert thermique aux parois. La chambre de combustion est ici décomposée en deux zones, le coeur adiabatique et la couche limite thermique, mais la méthodologie est facilement généralisable à N zones, une zone étant définie par sa masse, sa température et les concentrations des différentes espèces. Le jeu d'hypothèses de modélisation est le suivant :

- le mélange réactif se comporte comme un gaz parfait ;
- l'écoulement est supposé incompressible : l'uniformisation de la pression dans la chambre est considérée comme instantanée ;
- seule la contribution de la convection forcée est prise en compte ;
- le coeur adiabatique est considéré comme un réacteur parfaitement homogène ;
- le piégeage du mélange dans les crevices n'est pas pris en compte.

Les auteurs récapitulent les interactions alors possibles entre ces deux zones dans la figure 2.10. Elles peuvent échanger :

- de la masse ;
- de la chaleur avec la paroi, dans le cas de la couche limite, ou de la chaleur avec l'autre zone dans le cas général, par un mécanisme similaire à celui de la conduction thermique ;
- du travail avec le piston.

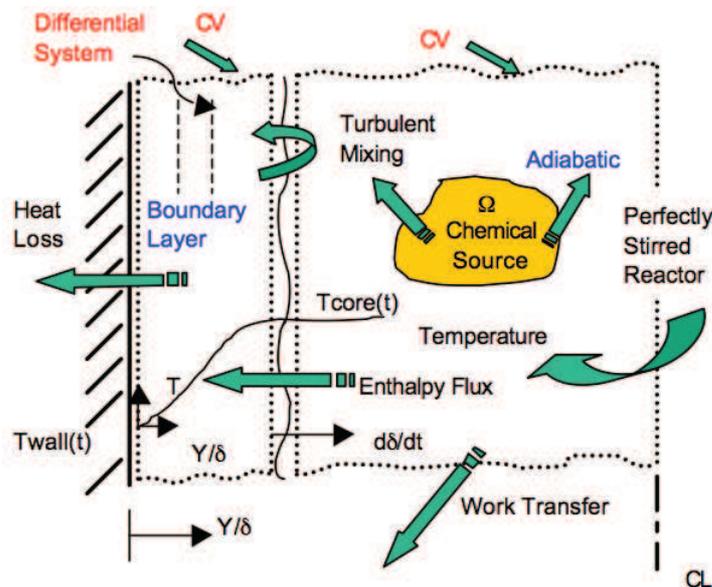


FIGURE 2.10 – Modèle d'interaction entre le cœur adiabatique et la couche limite thermique, Fiveland et Assanis [36]

Il est montré que ce modèle permet de rendre compte du piégeage du mélange réactif dans la couche limite, phénomène qu'il est nécessaire de capter si l'on veut représenter numériquement les effets de quenching aux parois. Les résultats obtenus par cette modélisation en deux zones sont également comparés à ceux obtenus avec une seule zone, mais utilisant des corrélations pour représenter les transferts thermiques. Les auteurs mettent ainsi en avant l'importance d'une prise en compte, même très simplifiée, de toute la dynamique spatiale et soulignent l'incapacité d'une unique zone à décrire correctement le comportement de la combustion dans un moteur CAI/HCCI et à prédire les émissions de HC et de CO. Depuis cette étude, d'autres développements ont été apportés à l'approche multi-zones. Easley *et al.* [27] discrétisent le volume de la chambre de combustion en six zones entre lesquelles les transferts de chaleur et de masse sont négligés, les distributions initiales de température et de masse étant imposées. De plus, les auteurs supposent que l'épaisseur de la couche limite thermique est constante. Malgré toutes ces hypothèses, ils montrent que le phénomène de piégeage de fluide réactif dans les crevices et la couche limite joue un rôle prédominant dans l'émission de HC et de CO liée à une combustion incomplète. Une stratégie plus fine est proposée par Aceves *et al.* [1, 2]. Un solveur CFD (KIVA) est utilisé pour générer les champs de température et de masse, du point mort bas (PMB) jusqu'à l'auto-inflammation ; en parallèle, une approche multi-zones est utilisée pour résoudre la thermochimie. L'architecture de ce solveur hybride suit les phases suivantes, répétées à chaque étape du calcul :

1. le code CFD (RANS jusqu'à récemment) calcule une distribution de température et de masse dans le cylindre après l'admission à partir de champs initialement homogènes. Les phénomènes de convection, de diffusion de masse et de transfert de chaleur sont donc pris en compte ;

2. les champs obtenus sont utilisés pour déterminer une répartition judicieuse de masse et de température dans chaque zone ;
3. le solveur des équations de la cinétique chimique 0D est utilisé pour calculer l'évolution des concentrations dans chacune des zones en prenant en compte l'historique de température ;
4. en-dehors de la zone contenant la couche limite thermique, où une corrélation de transfert thermique est appliquée, les zones sont supposées se comporter comme des coeurs adiabatiques.

Dans [1, 2], la chambre de combustion est décomposée en 10 zones qui n'échangent ni masse, ni chaleur. Les auteurs constatent dans [1] une sous-prédiction des émissions de HC et de CO alors que dans [2], les HC sont surestimés et le CO continue d'être sous-estimé. Pour apporter une explication aux écarts de prédiction, Flowers *et al.* [37] mettent cette stratégie hybride en oeuvre, cette fois-ci durant toute la phase de compression et d'expansion ; la chimie est ici résolue sur 20 zones de calcul qui n'échangent ni masse, ni chaleur. Ils mettent ainsi en évidence l'impact de la prise en compte des phénomènes de mélange, particulièrement durant la phase d'expansion, sur la qualité des prédictions du CO et des HC. Plus récemment, Komninou [66] inclut des modèles de transfert de chaleur et de masse entre les 16 zones discrétisant la chambre de combustion afin d'étudier l'impact du transfert de masse sur la formation des HC et du CO, toujours dans le cadre de la combustion dans les moteurs CAI/HCCI. Il montre que négliger ce phénomène avant le dégagement de chaleur caractérisant l'auto-inflammation entraîne une forte sous-estimation des HC piégés dans les crevices. Cette sous-estimation, même si elle existe, est moins importante dans le cas où les transferts de masse sont négligés pendant la phase de combustion et d'expansion. Enfin, l'auteur montre l'importance du mécanisme de formation du CO par oxydation partielle des HC dans les zones les plus proches des parois froides.

Pour repousser les limites numériques imposées par le coût prohibitif de résolution de la chimie complexe selon les approches LES et DNS, Jangi *et al.* [58] proposent et testent une méthode s'inspirant des principes du modèle multi-zones. A l'instar de ce dernier, elle permet de réduire le coût numérique imputable à l'intégration des équations de transport des nombreuses espèces impliquées dans le schéma cinétique. Une nouvelle méthode de décomposition du domaine physique y est introduite. Au lieu d'associer une zone à un ensemble de points recouvrant un volume continu dans le maillage physique, les auteurs développent l'idée de définir une zone comme un volume continu de l'espace des phases (ou espace des états thermochimiques). Selon ce nouveau mapping, on associe une zone de l'espace des phases à un ensemble de points appartenant au maillage physique et dont le nombre est presque directement relié au volume de la zone. De la même façon que pour la décomposition du domaine physique, plus une zone est petite, plus le nombre de points du maillage physique qu'elle contient est faible et plus l'estimation est précise et le coût numérique élevé. Le comportement du modèle converge donc vers celui de la DNS, ce qui n'est pas le cas pour les modèles multi-zones présentés précédemment (*c.f.* figure 2.9). Six cas-tests sont calculés pour tester le modèle : les simulations sont 2D ou 3D, l'écoulement est laminaire ou turbulent et différents combustibles associés à différents nombre de Lewis sont étudiés à différentes richesses du côté pauvre. Les résultats obtenus en couplant ce modèle à un solveur DNS sont systématiquement comparés à ceux obtenus par DNS complète. L'accord est remarquablement bon comme l'atteste la figure 2.11 ; cette dernière montre une comparaison des expansions d'un noyau de flamme H₂/air turbulente obtenues selon les deux approches.

Le temps de calcul est diminué d'un facteur allant de trois à cinq sans affecter significativement la précision des résultats. Le modèle apparaît donc comme particulièrement prometteur.

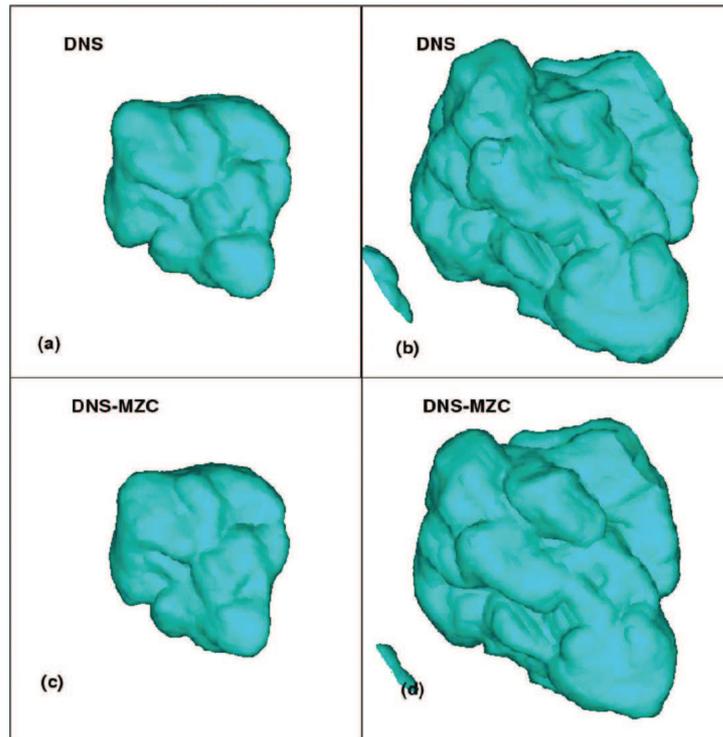


FIGURE 2.11 – Visualisation du front de réaction par suivi de l'iso-contour de température $T = 1100$ K, pour une flamme 3D turbulente H_2 /air. (a) et (c) : 0.17 ms après l'allumage ; (b) et (d) : 0.35 ms après l'allumage. Jangi *et al.* [58]

2.3.3.2 Limites de l'approche par zones et améliorations

Dans l'approche multi-zones décrite dans la sous-section précédente, la chimie est donc résolue sur un maillage beaucoup plus grossier que celui de l'écoulement. Il en résulte un coût numériquement très bas qui rend possible des études de la sensibilité de la combustion CAI/HCCI aux différents paramètres thermo-chimiques ou géométriques. Cependant, l'hypothèse d'homogénéité de la chimie sur des volumes aussi grands s'accompagne nécessairement d'une perte d'informations pouvant notablement affecter la qualité des prédictions.

Hawkes *et al.* [50] testent a posteriori le comportement du modèle multi-zones en l'initialisant à partir de champs extraits de DNS 2D de l'auto-inflammation d'un milieu présentant des inhomogénéités de température [12] ; la réponse du modèle est ensuite comparée aux données DNS. Le but de cette étude est de déterminer les conditions physiques pour lesquelles la résolution de la chimie par zones est justifiable. Les auteurs montrent que :

- dans le cas où l'écoulement est au repos mais qu'un **champ de température inhomogène** est initialement prescrit, la qualité des prédictions se dégrade quand l'écart-type des fluctuations de température augmente. Il s'agit d'une conséquence directe du fait que l'impact des inhomogénéités des champs thermo-chimiques est négligé dans une zone : plus les fluctuations sont faibles, plus les flux diffusifs de chaleur sont négligeables, et plus le comportement du système réactionnel tend vers celui d'un réacteur homogène. Les auteurs concluent logiquement que le modèle multi-zones permet de bonnes prédictions dans les cas où les échelles spatiales caractéristiques des fluctuations

sont suffisamment grandes ;

- dans le cas où l'**écoulement est turbulent**, toujours en initialisant un **champ de température présentant des fluctuations**, les prédictions du modèle multi-zones se dégradent. De plus, l'augmentation de l'échelle spatiale caractéristique des fluctuations de température ne s'accompagne plus d'une amélioration de la qualité des prédictions. En effet, l'étirement par la turbulence des iso-contours de température est responsable de la diminution de la longueur des fluctuations de température, et donc de l'augmentation de la contribution de la diffusion, ce qui rend inopérant le modèle multi-zones.

La validité du modèle multi-zones est donc limitée au cas où la contribution des mécanismes de diffusion moléculaire ou turbulente peut être considérée comme négligeable par rapport à la contribution de la cinétique chimique dans une zone. Le nombre de Damköhler est approprié pour mesurer la pertinence du modèle. Il compare un temps de mélange à un temps chimiques. Si $Da \gg 1$, les processus chimiques sont beaucoup plus rapides que le mélange turbulent et pilotent donc la combustion ; l'utilisation du modèle multi-zones est alors justifiée. Sinon, les contributions 3D du mélange ne peuvent plus être négligées. Elles impactent alors l'histoire de la thermochimie qui ne peut plus être modélisée par une approche purement 0D.

Compte-tenu de l'importance du transport de l'enthalpie dans le développement de la combustion CAI/HCCI, Cook *et al.* [17] proposent un modèle fondé sur un système d'équation de type flammelette et basé sur l'enthalpie, dans l'optique d'apporter une amélioration au modèle multi-zones. Ce système est obtenu en projetant les équations de transport générales de la température et des N espèces impliquées dans le schéma cinétique dans un repère attaché aux iso-surfaces d'enthalpie et en négligeant les termes d'ordre supérieur à 1 en variation spatiale d'enthalpie. Ils montrent, dans un premier temps, qu'en négligeant les phénomènes diffusifs, ce système est équivalent au système chimique résolu dans chaque zone par le modèle multi-zones. Cependant, tel qu'il est formulé, ce nouveau modèle prend en compte l'évolution temporelle de la PDF et peut donc rendre compte à la fois des régimes de propagation spontanée et déflagrative, alors que l'approche multi-zones est limitée à la description du régime spontané uniquement. Afin de comparer la qualité des prédictions des deux approches, les auteurs post-traitent les DNS présentées dans [12] en utilisant le nouveau formalisme et comparent les résultats à ceux obtenus par [50] avec le modèle multi-zones original. Sans surprise, la nouvelle approche permet de meilleures prédictions. Cependant, leur qualité se dégrade rapidement dès lors que l'écart-type des fluctuations de température devient trop important. De plus, dans la démarche de validation de cette nouvelle approche, la PDF dans chaque zone est calculée à partir de la DNS ; on peut anticiper une dégradation des prédictions dans le cas où cette PDF n'est pas connue et qu'on doit la transporter, voire la présumer. Enfin, le taux de dissipation scalaire de l'enthalpie apparaît comme un paramètre du modèle et la modélisation de cette quantité n'est pas triviale. Il semble donc que la description fine de l'auto-inflammation HCCI dans un milieu présentant de fortes fluctuations de température nécessite la mise en oeuvre d'autres approches.

2.3.3.3 Approches plus générales : modélisation de sous-maille RANS et LES

Les modèles multi-zones sont donc développés spécifiquement pour permettre une description de la combustion CAI/HCCI à moindre coût et tester la sensibilité de ce mode de combustion aux paramètres thermochimiques ou géométriques. Cependant, lorsque le transport diffusif (moléculaire ou turbulent) de la température affecte trop localement les mécanismes de la cinétique chimique, cette approche ne per-

met plus de prédiction correcte. Des approches plus conventionnelles où les zones chimiques se réduisent classiquement aux mailles du calcul CFD sont alors adoptées.

Colin *et al.* [16] proposent une méthode qui, couplée à un solveur RANS, permet une description correcte de la combustion à basse température. Deux quantités sont à la base de ce modèle : la fraction massique d'une espèce fictive Y_I définie de manière à valoir 1 lorsque le délai de flamme froide est atteint dans la simulation, et la fraction massique du carburant Y_F . Alors que Y_I est représentative de la combustion lente à basse température, Y_F permet de suivre les phénomènes rapides à haute température. La stratégie est la suivante :

- indépendamment du calcul RANS 3D, des réponses de réacteurs homogènes à pression constante sont calculées sur toute une gamme de pression et de température. Les délais de flamme froide sont stockés dans une base de données ainsi que le taux de dégagement de chaleur de flamme froide et le terme source d'une variable de progrès définie à partir de Y_F en faisant l'hypothèse de nombre de Lewis unitaire ;
- durant le calcul RANS 3D, Y_I et Y_F sont transportées. Pendant la phase de flamme froide, les termes sources sont estimés par approximations linéaires utilisant pour la première le délai de flamme froide et pour la seconde, un temps caractéristique de consommation du carburant. L'auto-inflammation principale est décrite classiquement sur la base de termes sources tabulés en fonction de la variable de progrès (*c.f.* chapitre 4) .

Le modèle est validé par comparaison entre les résultats du modèle et des mesures effectuées sur moteur HCCI. Il permet de capter les principales caractéristiques du fonctionnement du moteur et semble offrir un bon compromis en termes de précision et de temps de calcul.

Zhang *et al.* [135] étudient l'influence des interactions turbulence/chimie sur l'auto-inflammation HCCI du *n*-heptane et sur les émissions de CO et des HC imbrûlés. Ils utilisent une méthode de transport, par un solveur de type RANS, des densités de probabilité (PDF) associées à l'enthalpie et aux 40 espèces chimiques impliquées dans le schéma réactionnel. Ces PDF sont modélisées en utilisant une méthode hybride particule/volume fini. Une étude de sensibilité est menée (richesse, température des parois, nombre de swirl entre autres) ; les résultats obtenus en transportant les PDF et donc en prenant en compte les interactions turbulence/chimie, sont comparés à ceux obtenus sans transport de PDF. Cette comparaison permet de montrer que dans un milieu homogène en composition, la turbulence a un faible impact sur le délai d'auto-inflammation mais un impact non-négligeable sur les émissions de polluants qu'elle augmente. En augmentant le nombre de swirl et l'amplitude des inhomogénéités de composition, le délai d'auto-inflammation est diminué mais les concentrations des polluants émis deviennent significativement plus fortes.

2.4 Conclusions

La combustion turbulente au sens large et ici, l'auto-inflammation, présentent une très large gamme d'échelles spatio-temporelles, à cause des phénomènes de transports moléculaires et turbulents, et de la dynamique complexe des processus chimiques. La description numérique fine de l'auto-inflammation dans toute sa richesse nécessite des moyens de calculs encore trop importants et c'est la raison pour laquelle ce phénomène a été étudié par l'intermédiaire de problèmes physiques modèles, ayant pour intérêt, en plus d'être abordables numériquement, de séparer les contributions des différents phénomènes

physico-chimiques.

Il a été montré dans la première section de ce chapitre que l'auto-inflammation dans un milieu inhomogène en température et en composition avait lieu préférentiellement dans une zone où le taux de dissipation scalaire conditionné à une valeur de la fraction de mélange est faible, cette valeur particulière de la fraction de mélange étant celle qui minimise le délai d'auto-inflammation. En outre, plus en rapport avec la problématique de la combustion dans les moteurs CAI/HCCI où seules des inhomogénéités de température existent en théorie, il a été montré que les longueurs caractéristiques des fluctuations de température sont déterminantes dans la sélection du ou des régime(s) de propagation (déflagratif, *i.e.* piloté par la diffusion, ou spontané et pouvant s'accompagner de fortes ondes de pression) adopté(s) par l'auto-inflammation [133, 6, 12], particulièrement dans l'instant précédant le brusque dégagement de chaleur caractérisant le phénomène. Pour qu'il puisse être prédictif, un modèle dédié à la combustion CAI/HCCI doit donc être en mesure de rendre compte le plus fidèlement possible du transport turbulent de la température, ou de manière équivalente, de l'enthalpie.

Si les longueurs caractérisant des fluctuations spatiales de température sont « suffisamment » grandes, et plus généralement si $Da \gg 1$, le modèle multi-zones apparaît comme un excellent compromis entre coût numérique et précision. Plus précisément, ces longueurs doivent être du même ordre de grandeur ou supérieures à la dimension caractéristique d'une zone. Sinon, on sort du domaine de validité de ce type de modèle et la qualité des prédictions se dégrade très rapidement, quelles que soient les améliorations que l'on apporte à la modélisation de la chimie dans chaque zone. D'autres approches moins spécifiques à la description de la combustion en mode CAI/HCCI sont alors adoptées. Elles sont basées sur des stratégies de modélisation de sous-maille par tabulation, ou de transport de PDF.

Cette synthèse de l'état de l'art permet de mettre en évidence un axe d'étude encore inexploré par les simulations numériques directes. En effet, toutes ces simulations présentées ont été effectuées en considérant la turbulence comme homogène et isotrope. Cette approche s'est montrée puissante mais elle néglige les effets d'histoire qui contribuent nécessairement à l'initiation et donc au développement de l'auto-inflammation dans des systèmes réels comme les moteurs à combustion interne. A la lumière de cette observation, on proposera une stratégie de modélisation d'une séquence d'admission réaliste qui permettra d'étudier l'impact de l'anisotropie et de l'inhomogénéité statistique d'un écoulement turbulent 3D et instationnaire sur l'auto-inflammation en mode CAI/HCCI.

Chapitre 3

Outils de la simulation numérique de la combustion turbulente

Sommaire

3.1	Introduction	51
3.2	Equations générales de la mécanique des fluides et de la thermochimie	53
3.2.1	Description de l'état du système en combustion turbulente	53
3.2.2	Équations générales de l'aérothermochimie	56
3.2.3	Grandeurs caractéristiques de la combustion turbulente	59
3.3	Description du code SiTCom	64
3.3.1	Méthodes numériques mises en oeuvre dans SiTCom	64
3.3.2	Conditions aux limites	67

3.1 Introduction

Les tourbillons dans les fluides sont des objets/phénomènes observés dès l'Antiquité, mais c'est Léonard de Vinci (1452-1519) qui, le premier, étudia la formation de ces structures à caractère rotationnel dans un fluide et décrivit, par l'observation, la mécanique fine du phénomène. On lui doit le qualificatif encore usité de nos jours de *turbulent* dont le sens étymologique est *relatif à la foule*. A travers cette image, De Vinci traduit son impression selon laquelle les particules fluides, à la manière d'une foule d'humains agités, ont des dynamiques tumultueuses et imprévisibles, sans pour autant être dénuée de cohérence. A l'observation de ses croquis, il est évident que l'harmonie émergeant de cet apparent embrouillamini n'a pas échappé à l'artiste (*c.f.* image 3.1).

La turbulence, dynamique dans laquelle coexistent l'« ordre » et le « désordre », a fasciné non seulement les artistes, mais aussi les scientifiques qui y reconnaissent un phénomène d'une complexité remarquable. Dans le ciel ou l'océan, autour des ailes des oiseaux ou des avions, autour des nageoires des poissons comme autour de la coque des navire, les écoulements turbulents sont légion. La capacité qu'a l'Homme à prévoir le temps qu'il fera demain ou celle qu'il a de se propulser dans les airs, dans l'eau ou sur terre en optimisant la quantité d'énergie nécessaire sont conditionnées par le niveau de compréhension qu'il a de la turbulence.



FIGURE 3.1 – Croquis des tourbillons dans un écoulement turbulent, par Léonard de Vinci

La problématique principale de la recherche en sciences pour l'ingénieur réside dans la prédiction du comportement d'un fluide. Ainsi, dans les années 1880, les équations dites de Navier-Stokes (du nom du physicien et ingénieur français Claude-Louis Navier et du physicien et mathématicien anglais George Stokes (1819-1903)) sont-elles établies. Ces équations aux dérivées partielles non-linéaires sont supposées être capable de décrire mathématiquement toute la dynamique complexe de la turbulence. Cependant, aucune solution analytique générale (si elle existe ?..) n'a encore été proposée, faisant du problème de la turbulence l'un des sept défis mathématiques majeurs posés par le Clay Mathematical Institute en 2000. Pour l'instant, seule l'intégration numérique de ces équations peut permettre une prédiction du comportement d'un fluide turbulent tel qu'on le rencontre dans les configurations industrielles. Et là encore, des difficultés apparaissent.

Tout d'abord, les puissances de calculs n'étant pas infinies, un problème appartenant à la mécanique des milieux continus doit d'abord être converti sous forme discrète, la solution numérique étant calculée en chaque point d'un maillage. On imagine bien que pour représenter l'intégralité des structures turbulentes sur ce maillage selon l'approche DNS ou Direct Numerical Simulation, considérée comme exacte, la taille caractéristique de la maille doit être inférieure à la taille du plus petit tourbillon. Cette contrainte limite les cas accessibles à la simulation directe, le nombre de mailles nécessaires à ce niveau de description devenant très rapidement inabordable. De plus, bien que déterministe, la dynamique d'un écoulement turbulent est non-linéaire et toute prédiction à son sujet se trouve limitée par son extrême sensibilité aux conditions initiales. Pour repousser cette limitation, les codes de calculs dédiés à l'intégrations des équations de la mécanique des fluides doivent inclure des méthodes numériques précises.

Il est bien évident que pour décrire une flamme turbulente, il faut "ajouter" à la complexité de la dynamique d'un écoulement turbulent celle propre à la dynamique hautement non-linéaire de la chimie de la combustion ; on franchit ainsi un nouveau cap dans la difficulté de la description. Et il n'est

pas encore question du problème de l'atomisation et des phénomènes émergeant des interactions turbulence/chimie/gouttes dans un moteur à combustion interne. En ce sens, la description numérique de l'ensemble des phénomènes physiques impliqués dans la description de la combustion turbulente dans un moteur à combustion interne constitue encore un véritable défi.

3.2 Equations générales de la mécanique des fluides et de la thermochimie

Des axiomes et des approximations sont à la base de l'établissement des équations. Tout d'abord, la mécanique des fluides trouve son origine et ses fondements théoriques dans la mécanique classique selon laquelle, par principe physique, la masse, la quantité de mouvement et l'énergie sont des quantités conservées. L'établissement des équations de Navier-Stokes est basé sur ces principes de conservation. Ils stipulent que la variation d'une quantité dans un volume de contrôle \mathcal{V} est liée aux flux \mathbf{F} de cette quantité à travers la frontière de ce volume et aux effets des sources internes volumiques Q_v . La forme intégrale de ce principe pour un vecteur \mathbf{U} s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\mathcal{V}} \mathbf{U} dV + \oint_{\Sigma} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} dS = \int_{\mathcal{V}} Q_v dV, \quad (3.1)$$

où \mathbf{n} est le vecteur normal à la surface du volume de contrôle ; par convention, il pointe vers l'extérieur du volume. \mathbf{U} est le vecteur constitué des grandeurs conservatives moyennées sur une cellule. Dans l'équation 3.1, le premier terme représente l'évolution temporelle de \mathbf{U} sur le volume de contrôle \mathcal{V} . Le second quantifie les échanges de flux sur les surfaces délimitant la cellule. Il inclue ici les flux diffusifs et convectifs.

De plus, dans l'approximation classique, un gaz est assimilé à une assemblée de molécules qui se heurtent entre elles comme des objets pleins. Mais en supposant que les échelles spatiales caractéristiques de la dynamique du fluide sont beaucoup plus grandes que le libre parcours moyen (i.e. distance moyenne que parcourt une particule entre deux collisions), le fluide peut être vu comme un milieu continu et les propriétés de la mécanique statistique telles que la densité, la pression, la température ou la vitesse prennent leur sens. La validité de cette approximation peut être éprouvée via le nombre adimensionnel de Knudsen, généralement noté Kn . Il n'est autre que le rapport du libre parcours moyen des molécules à la plus dimension de la particule, représentée généralement par son diamètre. Lorsque ce nombre n'est plus négligeable devant 1, on est en présence d'un gaz raréfié et la mécanique des fluides obéit à d'autres lois que celles présentées dans la suite de ce manuscrit.

Enfin, dans la suite, les fluides étudiés seront considérés comme newtonien, c'est-à-dire que le tenseur des contraintes visqueuses est une fonction linéaire du tenseur des déformations, le facteur de proportionnalité étant la viscosité, qui est donc considérée comme indépendante du taux de cisaillement.

3.2.1 Description de l'état du système en combustion turbulente

3.2.1.1 Description de la composition du mélange

Décrire numériquement la combustion turbulente équivaut à connaître l'état thermochimique et aérodynamique en chaque maille. Pour caractériser le mélange réactif, c'est-à-dire les proportions dans lesquelles les espèces sont présentes, deux quantités peuvent être utilisées. Dans un volume donné, pour chaque espèce k , on peut définir la fraction massique notée Y_k comme le rapport entre la masse de

l'espèce k présente et la masse totale du mélange. On peut également choisir d'utiliser la fraction molaire X_k , rapport entre le nombre de moles de l'espèce k et le nombre total de moles. S'agissant de proportions, si N_{sp} composent le mélange, il vient directement que

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k = \sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k = 1. \quad (3.2)$$

De plus, on peut passer d'une fraction massique à une fraction molaire à l'aide du rapport entre la masse molaire de l'espèce k notée W_k et la masse molaire du mélange \bar{W} à l'aide de la relation

$$X_k = \frac{\bar{W}}{W_k} Y_k, \quad (3.3)$$

avec

$$\frac{1}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{Y_k}{W_k} = \frac{1}{\sum_{k=1}^{N_{sp}} X_k W_k}. \quad (3.4)$$

Ayant défini X_k et Y_k , on est maintenant en mesure de construire toutes les grandeurs nécessaires à la caractérisation de l'état aérothermochimique local d'un écoulement réactif turbulent.

3.2.1.2 Description des phénomènes thermochimiques

Outre la connaissance de la composition du mélange, l'état d'un système en combustion turbulente dans un volume de contrôle est déterminé par la donnée de :

- ρ : la masse volumique s'exprimant en $kg.m^{-3}$. Il s'agit de la masse ramenée à une unité de volume ;
- $u_i, i = 1, \dots, 3$: les composantes dans les trois directions du vecteur vitesse \mathbf{u} . Elles s'expriment en $m.s^{-1}$;
- une quantité représentative indifféremment de l'énergie massique présente dans le volume considéré (en $J.kg^{-1}$), de l'enthalpie massique (en $J.kg^{-1}$ également), de la température T (en K) ou encore de la pression p (en Pa)¹. Dans les travaux présentés dans ce manuscrit, on a choisi d'utiliser l'énergie totale non chimique E définie comme la somme de l'énergie sensible et de l'énergie cinétique ; son expression sera donnée dans la suite.

Toutes ces grandeurs déterminent intégralement l'état du système que l'on veut décrire et constituent les composantes du vecteur des variables dites primitives noté \mathbf{U} .

$$\mathbf{U} = (\rho, u_1, u_2, u_3, E, Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_{sp}})^T. \quad (3.5)$$

Un autre choix équivalent de description est possible grâce au vecteur des variables conservatives \mathbf{U} ,

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, p, \rho E, \rho Y_1, \rho Y_2, \dots, \rho Y_{N_{sp}})^T. \quad (3.6)$$

Il sera supposé dans la suite que le gaz réactif est parfait, c'est-à-dire que sa pression, sa masse volumique et sa température sont reliées par la loi des gaz parfaits

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{\bar{W}} T, \quad (3.7)$$

1. Ces quantités sont équivalentes du point de vue de la description ; on passe aisément des unes aux autres par l'intermédiaire de lois et de tables thermochimiques.

où $\mathcal{R} = 8.3145 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ est la constante des gaz parfaits. Par définition, l'énergie sensible d'une espèce k s'écrit

$$e_{sk} = \int_{T_{ref}}^T c_{vk}(T') dT' - \frac{\mathcal{R}T_{ref}}{W_k}, \quad (3.8)$$

où c_{vk} est la capacité calorifique massique à volume constant de l'espèce k , fonction uniquement de la température, et T_{ref} la température de référence. Plus précisément, $c_{vk} = (\partial e_k / \partial T)_V$ où e_k est l'énergie interne massique de l'espèce k . Pour un gaz parfait, c_{vk} peut être relié à la capacité calorifique massique à pression constante c_{pk} selon l'égalité

$$c_{pk} - c_{vk} = \frac{\mathcal{R}}{W_k}. \quad (3.9)$$

Pour calculer ces quantités pour le mélange, on introduit les définitions suivantes :

$$c_p = \sum_{k=1}^{N_{sp}} c_{pk} Y_k \quad (3.10)$$

$$\text{et } c_v = \sum_{k=1}^{N_{sp}} c_{vk} Y_k. \quad (3.11)$$

le rapport de ces capacités calorifiques massiques du mélange étant noté γ ,

$$\gamma = \frac{c_p}{c_v}. \quad (3.12)$$

De la même façon, l'énergie sensible du mélange s'écrit comme

$$e_s = \sum_{k=1}^{N_{sp}} e_{sk} Y_k, \quad (3.13)$$

qui devient, en utilisant 3.8,

$$\begin{aligned} e_s &= \sum_{k=1}^{N_{sp}} \left(\int_{T_{ref}}^T c_{vk}(T') dT' - \frac{\mathcal{R}T_{ref}}{W_k} \right) Y_k \\ &= \int_{T_{ref}}^T c_v(T') dT' - \frac{\mathcal{R}T_{ref}}{\bar{W}}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

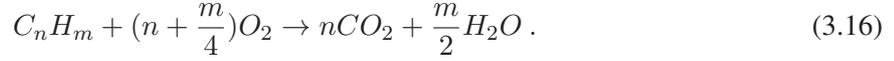
Finalement, on détermine l'énergie totale non-chimique E comme la somme de l'énergie sensible e_s et de l'énergie cinétique e_c ,

$$\begin{aligned} E &= e_s + e_c \\ &= \int_{T_{ref}}^T c_v(T') dT' - \frac{\mathcal{R}T_{ref}}{\bar{W}} + \frac{1}{2} u_i u_i. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Comme expliqué précédemment, déterminer entièrement l'état aérothermochimique d'un volume de contrôle revient à déterminer les différentes composantes du vecteur des variables primitives ou conservatives : il reste donc à établir leur équation de transport. Mais avant, on décrit, dans ses grandes lignes, la stratégie la plus précise de modélisation de la cinétique chimique.

3.2.1.3 Outils théoriques de description de la cinétique chimique

La description par une équation stœchiométrique globale d'une réaction chimique telle que la combustion du méthane ne peut permettre d'en appréhender que les états initiaux et finaux. Ainsi, dans le cas général, la transformation globale chimique de combustion peut-elle s'écrire



Elle se traduit dans le cas du méthane CH_4 sous la forme



Cependant, pour représenter le plus fidèlement possible la cinétique chimique fine de la flamme, on doit être capable de décrire l'enchaînement des étapes élémentaires ainsi que déterminer la vitesse associée à ces réactions. Si la réaction de combustion implique N_{sp} espèces dans N_r réactions élémentaires, ces dernières peuvent s'écrire de façon compacte comme

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu'_{rk} \mathcal{E}_k \leftrightarrow \sum_{k=1}^{N_{sp}} \nu''_{rk} \mathcal{E}_k \quad , \quad r = 1, \dots, N_r , \quad (3.18)$$

où \mathcal{E}_k représente la $k^{\text{ème}}$ espèce, ν'_{rk} et ν''_{rk} sont les coefficients stœchiométriques de cette espèce dans la réaction élémentaire r . Le taux d'avancement de la réaction r , noté $\dot{\Omega}_r$, s'écrit

$$\dot{\Omega}_r = k_{fr} \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{\nu'_{rk}} - k_{br} \prod_{k=1}^{N_{sp}} [X_k]^{\nu''_{rk}} , \quad (3.19)$$

$[X_k]$ étant la concentration molaire de l'espèce k . k_{fr} et k_{br} sont respectivement les constantes de taux de réaction direct et indirect de la $r^{\text{ème}}$ réaction. Le taux de réaction de chaque espèce $\dot{\omega}'_k$, exprimé en $kg.m^{-3}.s^{-1}$, est défini comme la somme des taux de production $\dot{\omega}_{kr}$ de chaque réaction élémentaire impliquant l'espèce k , *i.e.*

$$\dot{\omega}'_k = \sum_{r=1}^{N_r} \dot{\omega}_{kr} = W_k \sum_{r=1}^{N_r} (\nu'_{rk} - \nu''_{rk}) \dot{\Omega}_r \quad (3.20)$$

et on obtient finalement le taux de réaction de l'espèce k , noté $\dot{\omega}_k$, exprimé en s^{-1} et utilisé dans les équations de transport des fractions massiques et de l'énergie totale non-chimique présentées dans la suite de ce manuscrit,

$$\dot{\omega}_k = \frac{\dot{\omega}'_k}{\rho} . \quad (3.21)$$

Un schéma cinétique est une base de données regroupant toutes les constantes présentées ci-dessus et nécessaires au calcul des $\dot{\omega}_k$. Ses entrées sont la température, la pression et les fractions massiques Y_k et peuvent aisément être obtenues à partir des vecteurs des variables conservatives ou primitives qu'il reste à déterminer : dans la section suivante, on exposera les EDP décrivant la dynamique complexe d'un écoulement turbulent réactif [104].

3.2.2 Les équations générales de la mécanique des fluides réactifs

3.2.2.1 Conservation de la masse ou équation de continuité

Sauf dans des cas extrêmes faisant intervenir des réactions nucléaires, la masse est une quantité physique conservée. Un bilan du flux de masse sur la frontière d'un volume fluide infinitésimal (*c.f.*

équation 3.1) donne

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0, \quad (3.22)$$

où x_i la composante dans la i -ème direction du vecteur position \mathbf{x} .

3.2.2.2 Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de conservation de la quantité de mouvement, également appelée équation de Navier-Stokes est obtenue en intégrant les flux de quantité de mouvement sur la frontière d'un volume de contrôle infinitésimal, en négligeant la contribution de forces de volume, on obtient l'équation suivante,

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} - \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = 0, \quad i = 1, 2, 3 \quad (3.23)$$

où $\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij}$ ² est le tenseur des contraintes qui tient compte des contraintes visqueuses τ_{ij} et de la pression p . Le 1^{er} terme correspond au terme de production/destruction temporelle nette de la quantité de mouvement dans un volume de contrôle fixe ; le 2^{ème} est le terme de convection de la quantité de mouvement par le champ de vitesse et le 3^{ème} décrit la dissipation de la quantité de mouvement par cisaillement visqueux . L'hypothèse de fluide newtonien permet d'exprimer τ_{ij} proportionnellement en fonction du déviateur du tenseur des déformations³ noté A_{ij} comme

$$\tau_{ij} = 2\mu A_{ij}, \quad (3.24)$$

où μ est le coefficient viscosité dynamique du fluide, à partir duquel on peut également définir le coefficient de viscosité cinématique $\nu = \mu/\rho$.

Le tenseur A_{ij} est défini comme

$$A_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{1}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}. \quad (3.25)$$

3.2.2.3 Conservation de l'énergie totale non chimique

L'énergie totale non chimique E est définie comme la somme de l'énergie sensible et de l'énergie cinétique (*c.f.* équation 3.15). L'impact des réaction chimiques sur cette quantité doit donc apparaître explicitement dans son équation de conservation,

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j E}{\partial x_j} - \frac{\partial u_i \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} = \rho \dot{S}. \quad (3.26)$$

A l'instar de l'équation de conservation de la quantité de mouvement, les deux premiers termes correspondent respectivement à production/destruction temporelle nette d'énergie dans un volume de contrôle fixe et à sa convection par le champ de vitesse. Le 3^{ème} terme représente la production d'énergie par dissipation visqueuse et le 4^{ème}, sa diffusion. \dot{S} est un terme de production/consommation d'énergie. Il peut décrire mathématiquement, par exemple, l'impact des transferts radiatifs (que l'on ne prendra pas en compte dans la suite) ou des réactions chimiques si l'écoulement est réactif. \dot{S} dans ce dernier cas sera noté $\dot{\omega}_T$; il est appelé terme de dégagement chimique de chaleur. L'équation 3.26 s'écrit alors

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j E}{\partial x_j} - \frac{\partial u_i \sigma_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} = \rho \dot{\omega}_T. \quad (3.27)$$

2. δ_{ij} est le tenseur de Kronecker

3. les composantes du tenseur des déformations $\nabla \times \mathbf{u}$ sont les quantités $\partial u_i / \partial x_j$

En négligeant la diffusion différentielle des espèces, le flux d'énergie q_i est réduit à la seule contribution de la diffusion de la chaleur, modélisée comme suit par la loi de Fourier,

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}. \quad (3.28)$$

Le terme de dégagement chimique de chaleur $\dot{\omega}_T$ intervenant dans l'équation (3.27) est calculé en fonction des enthalpies de formation des espèces $\Delta h_{f,k}^0$ et des taux de réaction des N_{sp} espèces $\dot{\omega}_k$ (c.f. 3.21) de la manière suivante,

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k. \quad (3.29)$$

3.2.2.4 Conservation des scalaires passifs/réactifs

Pour inclure la description fine de la chimie de la flamme, la composition locale exacte du fluide doit être connue et toutes les N_{sp} espèces impliquées dans le schéma réactionnel doivent être transportées dans le solveur. Les fractions massiques Y_k ou molaires X_k des espèces sont affectées par les réactions chimiques de production/destruction, prises en compte de manière effective par le biais du taux de réaction $\dot{\omega}_k$. En termes de fractions massiques, on obtient

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Y_k}{\partial x_i} + \frac{\partial \rho J_i^k}{\partial x_i} = \rho \dot{\omega}_k. \quad (3.30)$$

J_i^k est la composante dans la $i^{\text{ème}}$ direction du vecteur de flux diffusif de Y_k . En sommant Eq.3.30 sur toutes les espèces, comme $\sum_{k=1}^{N_{sp}} Y_k = 1$, il vient de l'équation de continuité 3.22 que

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \dot{\omega}_k = 0. \quad (3.31)$$

De plus, il peut être intéressant de suivre l'évolution du mélange par le champ de vitesse turbulent, ce qui nécessite de définir la notion de scalaire passif ou traceur (noté Z dans la suite) et de résoudre son équation de transport. Un scalaire passif est une quantité qui, par définition, est transporté par l'écoulement mais ne l'affecte pas. Son évolution est donc décrite par une EDP semblable à l'équation 3.30, à la seule différence que son terme source est nul,

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i Z}{\partial x_i} + \frac{\partial \rho J_i^Z}{\partial x_i} = 0. \quad (3.32)$$

Les effets Soret, décrivant la diffusion de masse due aux gradients de température, et Dufour, décrivant l'effet inverse, sont ici négligés. Enfin, les flux diffusifs J_i^k et J_i^Z sont modélisés par une loi de Fick, équivalente à la loi de Fourier 3.28 dans le cas du transport des espèces,

$$J_i^\phi = -\mathcal{D}_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x_i}. \quad (3.33)$$

Remarque : les EDP présentées dans cette section (3.22, 3.23, 3.27 et 3.30) sont établies à partir de bilans basés sur la conservation de quantités physiques : les composantes du vecteur des variables conservatives sont donc naturellement directement accessibles par l'intégration de ces équations. Il est cependant possible, si on le souhaite, de basculer vers une description en variables primitives grâce à la matrice jacobienne $\mathbf{P} = \partial \mathbf{U} / \partial \mathbf{U}$. Des détails techniques seront donnés dans la section dédiée au formalisme NSCBC pour les conditions limites d'entrée.

3.2.3 Grandeurs caractéristiques de la combustion turbulente

3.2.3.1 La turbulence homogène et isotrope

Chassaing [11] écrit : « l'écoulement turbulent est un mode naturel de mouvement de fluides visqueux où des mécanismes internes d'échanges énergétiques assurent, au sein même de l'écoulement, la création et le maintien de toute une hiérarchie de mouvements chaotiques répartis continuellement sur une large gamme d'échelles macroscopiques ». On comprend alors que la caractérisation simple d'un écoulement turbulent entier ne pourra être possible que dans des cas limites très simplifiés. Ainsi, si la turbulence est homogène et isotrope (THI), c'est-à-dire indépendante statistiquement à la position où on l'observe dans l'espace et à la direction, l'hypothèse d'équivalence entre les statistiques d'ensemble et les statistiques spatiales est parfaitement justifiable. A partir de ces statistiques spatiales et d'arguments dimensionnels, on dispose d'un cadre théorique simple dans lequel toute la dynamique de l'écoulement peut être caractérisée par un nombre réduit de quantités physiques reliées entre elles par des nombres adimensionnels qui mesurent une caractéristique physique statistique de l'écoulement. Dans ce cadre idéalisé, la description de la dynamique de la turbulence dans l'espace spectral prend tout son sens. Elle permet de proposer une explication phénoménologique certes schématique mais au moins intelligible des mécanismes à l'oeuvre.

Spectre de l'énergie cinétique turbulente, de dissipation et cascade de Richardson

Pour étudier les écoulements turbulents, il peut être utile d'avoir recours à une décomposition des champs de pression et de vitesse en une partie moyenne et une partie fluctuante. Elle est nommée décomposition de Reynolds et pour la vitesse, elle s'écrit

$$u_i = \bar{u}_i + u'_i, \quad (3.34)$$

où \bar{u}_i et u'_i sont respectivement les composantes dans la $i^{\text{ème}}$ direction des vecteurs vitesse moyenne et vitesse fluctuante. On appelle énergie cinétique turbulente k l'énergie cinétique liée aux fluctuations du champ de vitesse. Elle est définie comme

$$k = \frac{1}{2} \overline{u'_i u'_i}. \quad (3.35)$$

En utilisant l'isotropie, on peut représenter la contribution de chaque nombre d'onde K à l'énergie cinétique turbulente k , indépendamment de la direction du vecteur d'onde ($K = ||\mathbf{K}||$) en définissant une densité spectrale $E(K)$ appelée spectre de l'énergie cinétique turbulente. k s'écrit donc en fonction de $E(K)$ comme

$$k = \int_0^\infty E(K) dK. \quad (3.36)$$

Dans l'équation de transport pour k , qui n'est pas présentée ici, on fait apparaître un terme de dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente, noté ϵ , qui s'écrit

$$\epsilon = \nu \overline{\frac{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}; \quad (3.37)$$

on montre que cette quantité peut être liée à la densité spectrale de l'énergie cinétique turbulente par la relation

$$\epsilon = \nu \int_0^\infty 2K^2 E(K) dK, \quad (3.38)$$

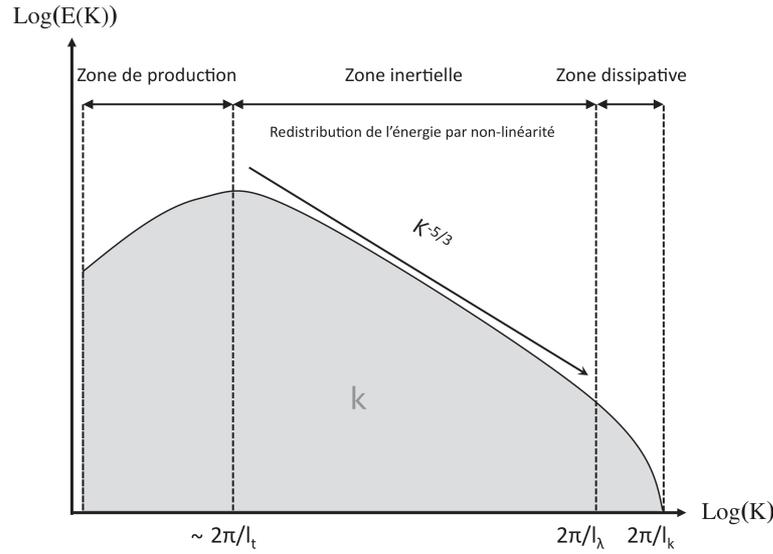


FIGURE 3.2 – Représentation du spectre de l'énergie cinétique turbulente

et ainsi, qu'on peut écrire la densité spectrale $D(K)$ de ϵ en fonction de celle de k comme

$$D(K) = 2\nu K^2 E(K). \quad (3.39)$$

De par la proportionnalité en K^2 , l'égalité 3.39 montre que le nombre d'onde contenant le plus d'énergie cinétique turbulente est plus petit que celui correspondant au maximum de la dissipation visqueuse. En d'autres termes, l'énergie est contenue dans des structures plus grandes que celles qui la dissipent. En outre, en réécrivant le membre de gauche de l'équation 3.23 en faisant apparaître la dérivée particulière de la quantité de mouvement, le terme non-linéaire de convection devient $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$. Si l'on observe, dans le domaine spectral, son effet sur une fluctuation 1D composée d'un seul mode K , on constate qu'il produit une fluctuation de nombre d'onde $2K$, c'est-à-dire que l'énergie cinétique turbulente est redistribuée des grandes structures, correspondant à de petits nombres d'ondes, aux petites structures, correspondant aux grands nombres d'ondes. Ces deux observations permettent à Kolmogorov de proposer en 1941 une modélisation de la dynamique de la THI selon le mécanisme de cascade énergétique, dont les fondements avaient été introduits par Richardson, dès 1922. Ce mécanisme est représenté dans la figure 3.2.

Dans la région du spectre séparant les petits nombres d'ondes des plus grands, le bilan d'énergie cinétique turbulente est supposé dominé par la contribution de la redistribution énergétique par les effets non-linéaire du terme d'« inertie » $\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u}$ de façon à vérifier la relation 3.38 ; c'est la raison pour laquelle cette zone est dite « inertielle ». Elle n'existe que si la gamme des échelles composant le spectre de l'énergie est suffisamment grande et on montre alors, par analyse dimensionnelle, que dans cette zone, $E(K)$ est proportionnelle à $K^{-5/3}$. Ce comportement dans la zone inertielle a été largement vérifié expérimentalement. De plus, trois échelles sont caractéristiques du spectre de l'énergie cinétique turbulente :

- **l'échelle spatiale de Kolmogorov** l_k est définie comme l'échelle de l'écoulement à laquelle les forces inertielle et les forces visqueuses se compensent. Ainsi, à cette échelle, toute la quantité

de mouvement est dissipée en chaleur par les effets visqueux : les dimensions caractéristiques spatiales et temporelles associées à la dynamique de cette échelle sont donc statistiquement les plus petites que l'on peut rencontrer dans l'écoulement. Si la séparation entre les grandes et les plus petites échelles est suffisante, le mouvement des petites échelles dépend uniquement du taux de dissipation et de la viscosité cinématique. Toujours par des arguments dimensionnels, on montre alors que

$$l_k \sim \left(\frac{\nu^3}{\epsilon} \right)^{1/4}. \quad (3.40)$$

On notera τ_k le temps caractéristique associé à l'échelle de Kolmogorov,

$$\tau_k \sim \left(\frac{\nu}{\epsilon} \right)^{1/2}. \quad (3.41)$$

La vitesse associée à l'échelle de Kolmogorov sera notée u_k ;

- **l'échelle spatiale intégrale** est la longueur l_t correspondant mathématiquement à la distance au-delà de laquelle deux volumes fluides dans l'écoulement sont considérés comme statistiquement décorrélés. Dans le spectre de l'énergie cinétique turbulente, elle délimite grossièrement l'entrée dans la zone inertielle et ne dépend donc pas de la viscosité. On montre, par analyse dimensionnelle, que l'on peut l'estimer via la relation

$$l_t \sim \frac{k^{3/2}}{\epsilon}. \quad (3.42)$$

On notera τ_t le temps caractéristique associé à l'échelle intégrale. Plus ou moins par abus, l'échelle intégrale est également assimilée à l'échelle à laquelle l'énergie cinétique turbulente est injectée dans l'écoulement, ce qui permet de l'assimiler à une longueur propre à la géométrie de la configuration ;

- entre les deux, **la micro-échelle de Taylor** l_λ est la plus grande échelle spatiale dont la dynamique est affectée significativement par la dissipation visqueuse,

$$l_\lambda \sim \sqrt{\frac{\nu k}{\epsilon}}. \quad (3.43)$$

Dans le spectre de l'énergie cinétique turbulente, elle marque donc la sortie de la zone inertielle et l'entrée dans la zone dissipative.

Nombres adimensionnels caractérisant un écoulement turbulent

Le nombre de Reynolds Re

C'est un nombre adimensionnel permettant d'estimer le rapport entre la contribution des forces inertielles, représentées par le 2^{ème} terme dans 3.23, qui ont pour effet de déstabiliser l'écoulement et de générer de nouvelles échelles turbulentes, sur les forces de dissipation visqueuse de la quantité de mouvement représentées par le 3^{ème} terme dans 3.23), dont l'effet est de laminariser l'écoulement, c'est-à-dire de dissiper les fluctuations de vitesse. Pour ce nombre, on doit se donner des grandeurs de références caractérisant l'écoulement : une vitesse U_{ref} , une longueur L_{ref} et un coefficient de viscosité cinématique ν_{ref} ,

$$Re = \frac{U_{ref} L_{ref}}{\nu_{ref}}. \quad (3.44)$$

Le nombre de Reynolds est donc caractéristique d'un écoulement laminaire s'il est petit et d'un écoulement turbulent s'il est grand. La donnée de U_{ref} et L_{ref} n'est pas toujours triviale ; celle de ν_{ref} l'est beaucoup plus, particulièrement pour un écoulement isotherme où la viscosité cinématique est constante sur tout le domaine. De plus, par définition, le nombre de Reynolds basé sur l'échelle de Kolmogorov est de l'ordre de l'unité.

Dans le cas de la THI, il est possible de définir un nombre de Reynolds turbulent Re_t , si l'on connaît la fluctuation typique u' (prise comme la racine carrée de l'énergie cinétique turbulente k) et l'échelle intégrale l_t ,

$$Re_t = \frac{u' l_t}{\nu}, \quad (3.45)$$

et de la même façon, on définit un nombre de Reynolds basé sur la micro-échelle de Taylor

$$Re_\lambda = \frac{u' l_\lambda}{\nu}. \quad (3.46)$$

On peut montrer que Re_λ évolue comme $(l_\lambda/l_k)^{3/4}$; il donne donc un renseignement sur l'étendue de la zone dissipative. Il est censé rendre compte d'une certaine universalité de la turbulence à petites échelles, permettant ainsi de comparer les écoulements de nature différente (grille, jet, couche limite). L'étendue de la gamme des échelles spatiales contribuant à la dynamique de l'écoulement turbulent est renseignée par Re_t qui évolue comme $(l_t/l_k)^{3/4}$.

Le nombre de Mach M

Il exprime le rapport entre la vitesse locale d'un écoulement et la vitesse du son $a = \sqrt{\gamma r T}$ dans ce même fluide,

$$M = \frac{|\mathbf{u}|}{a}. \quad (3.47)$$

On peut négliger l'effet des phénomènes de compressibilité, c'est-à-dire des phénomènes acoustiques, pour des nombres de Mach inférieurs à 0.3 environ : dans ce cas, l'écoulement sera dit incompressible.

3.2.3.2 Nombres sans dimension caractérisant les propriétés de transport moléculaire

Le nombre de Prandtl Pr

Ce nombre adimensionnel permet de comparer la vitesse de la dissipation visqueuse *i.e.* « diffusion » de la quantité de mouvement par rapport à celle de la diffusion de la chaleur. Il est donc naturellement défini comme le rapport entre le coefficient de viscosité cinématique ν sur le coefficient de diffusion de la chaleur $D_{th} = \lambda/\rho c_p$,

$$Pr = \frac{\nu}{D_{th}} = \frac{\mu c_p}{\lambda}. \quad (3.48)$$

Le nombre de Lewis associé à une espèce k Le_k

Le_k compare la vitesse de diffusion de la chaleur et la vitesse de diffusion de l'espèce k ; il est le rapport entre le coefficient de diffusion de la chaleur et le coefficient de diffusion de l'espèce considéré D_k ,

$$Le_k = \frac{D_{th}}{D_k} = \frac{\lambda}{\rho c_p D_k}. \quad (3.49)$$

Le nombre de Schmidt associé à une espèce k Sc_k

Il compare la vitesse de la dissipation visqueuse et la vitesse de diffusion de l'espèce k ,

$$Sc_k = \frac{\nu}{D_k} . \quad (3.50)$$

3.2.3.3 Quantités caractérisant les interaction combustion/turbulence dans un milieu prémélangé

Il est utile de classer les différents régimes de combustion en fonction des intensités du mélange moléculaire par diffusion et du mélange turbulent par convection, notamment pour valider certaines hypothèses de modélisation de la combustion turbulente en prémélangé.

Le nombre de Damkhöler Da

Il permet de comparer le temps de mélange turbulent assimilé au temps caractéristique de l'échelle intégrale τ_t à celui de la chimie τ_c et est défini comme

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} . \quad (3.51)$$

Si $Da \gg 1$, la dynamique de la chimie prédomine sur celle du mélange turbulent à grande échelle et la structure de front de flamme est peu affectée par la turbulence. Dans le cas contraire, si $Da \ll 1$, le mélange turbulent a eu le temps d'homogénéiser les champs thermo-chimiques et le comportement de la chimie tend vers celui que l'on observerait dans une configuration de type réacteur parfaitement agité (c.f. § 4.4.4.3).

Le nombre de Karlovitz Ka

On peut comparer le temps caractéristique chimique τ_c et le temps de Kolmogorov τ_k , par l'intermédiaire du nombre de Karlovitz qui s'écrit donc comme

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} . \quad (3.52)$$

Si $Ka \ll 1$, la dynamique des échelles de Kolmogorov est lente par rapport à celle de la chimie qui peut être vue comme indépendante des petites échelles de l'écoulement. Ce nombre joue le rôle de pendant aux petites échelles du nombre de Damkhöler : il est donc logique que l'on puisse relier les deux à l'amplitude de la gamme d'échelles présentes dans le spectre de l'énergie cinétique turbulente. En effet, en remarquant que τ_t/τ_k évolue comme $\sqrt{Re_t}$, on peut établir un lien entre Ka , Da et Re_t à partir la relation 3.52,

$$Re_t = Da^2 Ka^2 . \quad (3.53)$$

Cette relation montre que deux de ces trois nombres adimensionnels sont nécessaires à la caractérisation du régime de combustion dans un milieu prémélangé.

Description de la dynamique de la combustion

En prémélangé, pour estimer les nombres de Damköler et de Karlovitz, un temps chimique τ_c est nécessaire. Lorsque la combustion n'est pas établie et que les phénomènes transitoires sont de première importance, comme c'est le cas pour l'auto-allumage, τ_c peut être assimilé à un temps caractérisant la

dynamique globale de la thermochimie. Le délai d'auto-inflammation τ_{ig} est alors tout indiqué. Sinon, lorsque le régime propagatif établi domine la combustion, on peut construire τ_c à partir des propriétés cinématiques de la flamme que l'on est en mesure d'estimer : δ_f , son épaisseur caractéristique et S_L , sa vitesse de propagation par rapport aux gaz frais⁴. On a alors

$$\tau_c = \frac{\delta_f}{S_L}. \quad (3.54)$$

En général, δ_f est identifiée à l'épaisseur thermique δ_{th} du front de flamme, elle-même définie comme la somme des épaisseurs de la zone de réaction δ_r et de la zone de préchauffage δ_p .

3.3 Description du code SiTCom

Les équations de conservation de l'aérothermochimie ont été présentées dans la section 3.2. Elles font intervenir des dérivées partielles spatiales de premier et second ordre et temporelles de premier ordre. Parce que les capacités de calcul ne sont pas infinies, la résolution numérique de ces équations nécessite, d'une part, leur discrétisation dans l'espace et dans le temps et d'autre part, que le nombre de mailles soit limité, ce qui impose une contrainte sur la taille des volumes physiques que l'on peut étudier. Ainsi, si l'on souhaite effectuer une simulation numérique qui permette de capturer tous les détails de l'écoulement, même inerte, on peut montrer que le nombre de maille nécessaire N varie comme

$$N \propto Re^{9/4}. \quad (3.55)$$

Le nombre de maille augmente donc très rapidement avec les dimensions caractéristiques de la configuration que l'on aborde numériquement. Cependant, si l'on voulait rester parfaitement fidèle à la physique, il faudrait être en mesure de décrire l'écoulement en amont et en aval du volume d'étude, celui-ci impactant nécessairement l'écoulement à l'intérieur de ce volume. Bien entendu, la limite de puissance de calcul rend cette approche inapplicable. Ainsi, l'écoulement dans le domaine de calcul est-il généré par la prescription des conditions aux limites, qui sont donc d'une importance primordiale pour assurer la qualité de la description. Elles sont également nécessaires d'un point de vue mathématique à la fermeture aux frontières du système d'équations différentielles sous forme discrète. En compressible, les conditions aux limites jouent alors le rôle de garde-fou ; elles permettent de limiter l'impact de certains artefacts numériques qui peuvent mener à des instabilités perturbant la physique dont on souhaite rendre compte, voire à la divergence des calculs.

Cette section est consacrée à la méthodologie de discrétisation et d'intégration temporelle des équations de Navier-Stokes adoptée dans le solveur SiTCom dans sa version entièrement parallélisée, développé en FORTRAN 77 au sein du Complexe de Recherche Interprofessionnel en Aérothermochimie (CORIA). Le traitement numérique des conditions aux limites sera également abordé dans ses grandes lignes.

3.3.1 Méthodes numériques mises en oeuvre dans SiTCom

3.3.1.1 Formulation de type volume fini

Contrairement à la méthode des différences finies par laquelle on approxime les dérivées, la méthode des volumes finis exploite des approximations d'intégrales⁵ sur des volumes et se prête donc parti-

4. On peut également utiliser S_L^0 , la vitesse de propagation du front de flamme laminaire, stationnaire et non-étiré qui est du même ordre de grandeur que S_L et qui présente l'avantage de pouvoir être obtenue par un calcul 1D.

5. il en est de même pour la méthode des éléments finis

culièrement bien à l'intégration numérique des lois de conservation par une utilisation judicieuse du théorème de flux-divergence. SiTCom adopte cette discrétisation dans une approche de type *cell-centered*, où les inconnues correspondant aux valeurs moyennes sur les mailles sont ramenées au centre des cellules et sont alors dites co-localisées (*collocated arrangement*). A l'inverse, dans l'approche dite *vertex-centered* ou « centrées sommets », les inconnues sont situées au niveau des noeuds du maillage, ce type d'approche nécessitant l'interpolation des vecteurs vitesses aux interfaces des cellules afin d'évaluer les différents flux.

3.3.1.2 Discrétisation spatiale et intégration temporelle

Les flux eulériens sont déterminés à partir du schéma centré de quatrième ordre de Ducros *et al.* [26]. Cette formulation quatrième ordre est dégradée au voisinage des frontières du domaine pour obtenir un schéma du deuxième ordre. Ces schémas numériques sont dispersifs et les modes de Fourier sont transportés à des vitesses qui sont des fonctions du nombre d'onde, ce qui a pour effet de générer des oscillations purement numériques dont l'impact sur la physique décrite peut devenir non-négligeable, particulièrement au voisinage de discontinuités. Des termes de dissipation numérique sont donc ajoutés pour compenser artificiellement cette dispersion. Le solveur SiTCom inclut deux opérateurs de viscosité artificielle complémentaire selon la méthode proposée par Jameson *et al.* [57] :

- **la viscosité de deuxième ordre** agit comme une viscosité moléculaire. Elle ajoute de la dissipation pour lisser les gradients trop raides (par exemple, pour les discontinuités de contact), afin de limiter le mécanisme purement numérique de génération d'oscillations. Son action est contrôlée par un senseur qui déclenche son ajout dès qu'un seuil est franchi ;
- **la viscosité de quatrième ordre** tend à stabiliser les zones où l'on rencontre des instabilités numériques de longueurs d'ondes courtes, également appelées « wiggles ».

Les flux visqueux sont, quant à eux, approximés à l'aide d'un schéma centré du quatrième ordre classique, dégradé en un schéma décentré du troisième ordre au niveau des frontières.

La solution est avancée en temps avec le schéma Runge-Kutta TVD (*Total Variation Diminishing*) du troisième ordre proposé par Gottlieb et Shu [45]. Ce schéma explicite présente l'avantage d'un faible coût en termes de stockage. Les détails sur ces méthodes peuvent être trouvés dans le mémoire de thèse de Lodato [71].

3.3.1.3 Critères de stabilité numérique

En simulation numérique de la combustion turbulente, certaines précautions doivent être prises pour assurer la convergence du schéma numérique ainsi que la représentativité de la solution discrète. Elles reviennent toutes à imposer une limitation du pas de temps d'intégration temporel, le critère finalement retenu étant évidemment le plus restrictif. Ces critères sont basés sur des contraintes imposées, d'une part, par la propagation des informations inhérentes aux phénomènes de convection (critère *CFL*) et de diffusion (critère de Fourier *F*) et d'autre part, par l'intégration temporelle des fonctions raides que sont les termes source chimiques et le respect des principes physiques.

Convection et critère *CFL*

Pour les solveurs explicites en temps, le critère Courant Friedrichs Lewy (*CFL*) est une condition

nécessaire de stabilité numérique qui impose une borne supérieure à l'amplitude du pas d'avancement temporel δt . Simplement, cette condition traduit le fait que la distance parcourue par une information se déplaçant à une vitesse donnée durant un pas de temps numérique doit être inférieure à la distance séparant deux mailles ayant une face en commun. En d'autres termes, l'information ne doit pas « sauter » de maille sur une itération. L'information de la convection est portée par une onde dont la vitesse de propagation est $|\mathbf{u}| + a$ et $|\mathbf{u}| - a$ où $a = \sqrt{\gamma r T}$ est la vitesse du son. On obtient finalement

$$\delta t^{CFL} < CFL \times \min\left(\frac{\Delta_1}{|u_1| + a}, \frac{\Delta_2}{|u_2| + a}, \frac{\Delta_3}{|u_3| + a}\right). \quad (3.56)$$

La valeur du CFL est dépendante des schémas numériques de discrétisation spatiale utilisés, tant que l'avancement en temps est explicite. Dans SiTCom, avec des dérivées spatiales approximées au 4^{ème} ordre et pour un intégrateur temporel de Runge-Kutta à l'ordre 3, la valeur théorique du CFL est de 1. Pour assurer une certaine marge de sécurité, elle a été fixée à 0.9 dans les calculs présentés par la suite.

Diffusion et critère de Fourier

Le nombre de Fourier F est le pendant du nombre CFL pour la diffusion, son calcul reposant globalement sur les mêmes idées,

$$\delta t^F < F \times \frac{\min(\Delta_x^2, \Delta_y^2, \Delta_z^2)}{\mathcal{D}}, \quad (3.57)$$

où \mathcal{D} est le coefficient du phénomène diffusif/dissipatif considéré (diffusion de la température, des espèces ou dissipation de la quantité de mouvement).

Contraintes numériques liées à la description de la chimie

Une condition supplémentaire portant sur la limitation du pas d'intégration temporelle doit également être imposée au niveau des réactions chimiques. En effet, les termes source dans les équations de transport des espèces induisent de nouvelles contraintes qui ne sont plus liées à la convergence numérique mais au respect de principes physiques fondamentaux, comme la conservation de la masse. Ces termes sources peuvent être des fonctions très raides du temps à cause de leur caractère exponentiel et leur intégration peut poser des problèmes si le pas de temps est trop grand. Concrètement, cela peut se traduire par une production/destruction d'espèces trop importante et non-physique pouvant aboutir à des cas aberrants où $Y_k < 0$ ou encore $Y_k > 1$. On imagine bien les problèmes qui peuvent découler au niveau de la conservation de la masse ou de l'énergie. Ceci montre la nécessité d'imposer le critère suivant, donné ici pour l'espèce k ,

$$\delta t_k^c < \frac{\rho Y_k}{|\rho \dot{\omega}_k|}, \quad (3.58)$$

le pas de temps chimique global étant naturellement défini comme le minimum du pas de temps des espèces. Dans SiTCom, la dynamique des processus chimiques est représentée par celle d'une variable d'avancement notée Y_c . La limite du pas de temps imposée par la chimie est donc traduite par l'inégalité

$$\delta t^c < \frac{\rho Y_c}{\rho \dot{\omega}_c}. \quad (3.59)$$

Dans la pratique, on choisit généralement de prendre $\delta t^c = 0.01 \rho Y_c / \rho \dot{\omega}_c$.

3.3.2 Conditions aux limites

3.3.2.1 Formalisme NSCBC

En compressible, la prescription de conditions aux limites rigides (*i.e.* pour lesquelles on impose directement la valeur d'une quantité physique) génère des réflexions d'ondes acoustiques non-physiques qui peuvent modifier l'écoulement et donc la représentativité des calculs. La méthode des conditions limites caractéristiques a été proposée par Thomson [117] pour des systèmes d'équations différentielles hyperboliques (équations sans les termes diffusifs ou dissipatifs en mécanique des fluides) et étendue aux équations de conservation générales de la mécanique des fluides par Poinso et Lele [105]) sous le nom de Navier–Stokes Characteristic Boundary Conditions (*NSCBC*). Elle est basée sur une transformation des équations générales de la mécanique des fluides réactifs (*c.f.* section 3.2.2) en équations caractéristiques décrivant la propagation d'ondes porteuse de l'information physique. Les ondes sortant du domaine peuvent être déterminées à partir des points à l'intérieur du domaine et leur traitement numérique ne pose donc pas de problème. Cependant, les ondes entrantes arrivant de l'extérieur du domaine ne sont pas connues. Elles ne peuvent pas être calculées directement à partir de l'information contenue dans le domaine et doivent donc être modélisées. La procédure proposée est la suivante :

- Pour des raisons évidentes de praticité, les conditions aux limites sont généralement prescrites sur les variables primitives. Les équations de conservation de l'aérothermochimie sont donc traduites en vectoriel sous formes primitives dans une première étape, en introduisant la matrice jacobienne $P = \partial U / \partial \mathbf{u}$;
- en diagonalisant P , on aboutit à la formulation en ondes caractéristiques, les valeurs propres correspondant aux vitesses de propagations des ondes caractéristiques. On fait également apparaître les variations temporelles des amplitudes des ondes caractéristiques ;
- les conditions aux limites physiques, qui relient les variables primitives à l'amplitude des ondes caractéristiques, sont obtenues à partir de condition de relaxation des quantités primitives vers leur valeur cible, les coefficients de relaxation étant fixés par l'utilisateur⁶ ;
- les conditions sur les variables primitives sont finalement transposées aux variables conservatives.

A l'origine, les auteurs supposaient que ces ondes étaient monodimensionnelles et qu'elles se déplaçaient uniquement dans la direction perpendiculaire au(x) plan(s) d'entrée ou de sortie. Cette approche est donc efficace pour un écoulement orthogonal à la frontière. Cependant, lorsqu'il présente des fluctuations tridimensionnelles, des distorsions des grandeurs physiques peuvent apparaître. Lodato *et al.* [72] proposent de prendre en compte ces contributions transverses et généralisent ainsi l'approche NSCBC en 3D. C'est la stratégie mise en oeuvre dans SiTCom.

3.3.2.2 Génération d'un bruit turbulent corrélé en entrée : la méthode de Klein

Les conditions aux limites idéales doivent dépendre de la solution à l'extérieur du domaine sur lequel porte l'étude numérique. En toute logique, cette solution n'est pas connue. Dans la mesure où, généralement, ce sont les conditions aux limites qui mettent en mouvement le fluide dans le domaine physique, elles conditionnent la qualité de la représentation numérique. De plus, dans la majorité des ap-

6. Faire tendre la valeur de ces coefficients vers l'infini revient à imposer des conditions aux limites rigides, avec toutes les réflexions acoustiques que cela entend. En diminuant la valeur de ces coefficients, on limite les phénomènes acoustiques purement numérique mais on augmente le temps de la relaxation vers la valeur cible et on autorise la dérive des conditions aux limites par rapport aux valeurs cibles. En ce sens, le formalisme *NSCBC* permet de choisir le compromis le plus judicieux possible ; ce choix dépend des configurations abordées numériquement.

plications, l'écoulement entrant dans le domaine simulé est déjà turbulent et ses propriétés dynamiques doivent être représentées, au moins statistiquement.

Pour une quantité turbulente entrant dans le domaine, une méthode simple consisterait à superposer à un champ moyen obtenu expérimentalement des fluctuations aléatoires obtenues à partir d'un générateur de bruit blanc. Cependant, Klein *et al.* [63] montrent que cette approche est inopérante. En effet, le spectre que l'on obtient avec un bruit blanc est plat et k est répartie uniformément sur tous les nombres d'onde. Toute l'énergie contenue dans les petites structures est rapidement dissipée et k devient vite nulle : l'écoulement injecté se relaminarise donc très vite. Les auteurs proposent donc une méthode basée sur l'utilisation d'un filtre digital qui, une fois appliqué à un champ 3D de nombres aléatoires, permet de retrouver certaines propriétés statistiques en deux points en plus de k .

Dans ce chapitre, on a présenté les outils théoriques et numériques utilisés dans un solveur des équations de l'aérothermochimie. Les développements apportés aux cours de cette thèse afin de répondre aux questions qu'elle soulève seront exposés dans les chapitres suivants.

Chapitre 4

Modélisation de la thermochimie des flammes turbulentes par les méthodes de tabulation

Sommaire

4.1	Introduction	69
4.2	Problème de la complexité chimique	70
4.2.1	Présentation du problème	70
4.2.2	Réduction des schéma cinétiques	71
4.2.3	Réduction de la complexité des systèmes dynamiques	72
4.3	De la théorie des flammelettes à la tabulation de la chimie	73
4.3.1	Théorie des flammelettes et diagramme de Borghi	73
4.3.2	L'hypothèse des réacteurs homogènes et diagramme des régimes	75
4.4	La tabulation de la thermochimie	76
4.4.1	Présentation du problème de la tabulation	76
4.4.2	Espace des phases réduit	77
4.4.3	Différentes approches pour définir la variable d'avancement	80
4.4.4	Archétypes de la combustion laminaire et espace des phases	82
4.5	<i>In situ</i> Flamelet generated manifold approach	89
4.5.1	Introduction	89
4.5.2	Reduced phase space canonical-flame solution	91
4.5.3	Reduced phase space solution for IFM	95
4.6	Conclusions	104

4.1 Introduction

Dans une flamme turbulente, les échelles spatio-temporelles les plus petites sont associées aux processus chimiques, plus particulièrement aux espèces réactives intermédiaires, dont la dynamique peut être extrêmement rapide. Leur description numérique est complexe techniquement et encore beaucoup trop coûteuse pour pouvoir être intégrée dans le calcul de la combustion turbulente, dans une configuration industrielle et même de laboratoire. Des solutions doivent être proposées ; elles doivent permettre de

fournir les informations jugées essentielles dans un problème donné, pour un coût numérique raisonnable.

Dans ce chapitre, on présentera plus en détails ce problème de la complexité de la description numérique de la chimie. Les stratégies de réduction des schémas cinétiques ou de réduction de la complexité des systèmes dynamiques non-linéaires décrivant l'évolution de la thermochimie, permettant de répondre à cette problématique seront ensuite décrites dans les grandes lignes et on montrera comment les limitations qu'elles imposent ont mené à l'idée de la tabulation de la thermochimie. Puis, le cadre théorique dans lequel les techniques de tabulation s'inscrivent sera présenté. La théorie des flammelettes et le diagramme de Borghi seront ainsi introduits. Dans ce contexte théorique, le cas de l'auto-inflammation apparaît comme particulier et sera également discuté. L'exposé s'orientera ensuite plus spécifiquement vers les aspects techniques de la tabulation permettant à cette stratégie de s'imposer comme une solution intéressante dans la démarche de réduction chimique. Le concept d'espace des phases réduit sera développé, en parallèle à celui d'archétype de combustion. Enfin, après avoir souligné les limites de l'approche par tabulation, on présentera et testera une méthode s'en inspirant, mais permettant de s'extraire du problème du stockage des tables ; elle est basée sur une résolution *in situ* du système d'équations modélisant la thermochimie des flammes de prémélange stationnaires 1D étirées et son applicabilité à la simulation de la combustion turbulente réelle sera discutée.

4.2 Problème de la complexité chimique

4.2.1 Présentation du problème

Dans la section 3.2.1.2, on a montré que pour caractériser entièrement l'état aérothermo-chimique local d'un fluide, les composantes du vecteur des variables primitives, ou de manière équivalente, des variables conservatives, doivent être connues :

- les **3** composantes du vecteur vitesse pour déterminer l'**état aérodynamique** ;
- les fractions massiques ou molaires associées aux N_{sp} impliquées dans les sous-réactions de la combustion, pour déterminer l'**état chimique** ;
- **2** variables thermodynamiques (parmi ρ , P et T ou équivalent), la troisième étant déduite de la loi de gaz parfait, connaissant la composition, pour déterminer l'**état thermodynamique**.

On se concentre, dans cette section, sur les méthodes permettant de diminuer le nombre $N_{sp} + 2$ de variables nécessaires pour décrire l'état thermo-chimique. L'évolution spatiale et/ou temporelle d'un tel état peut être décrite par une trajectoire dans l'espace des phases ou espace des états. L'objectif des approches exposées par la suite est donc de diminuer le nombre de dimensions de cet espace descriptif, le seul levier résidant dans la réduction de N_{sp} .

Les mécanismes chimiques permettant la description de la dynamique fine de la flamme mettent en jeu un grand nombre d'espèces impliquées dans de nombreuses réactions élémentaires. On pourra prendre l'exemple du schéma cinétique du GRI-Mech 3.0 [108] développé pour décrire les mécanismes de la combustion méthane/air : 53 espèces chimiques sont impliquées dans 325 réactions élémentaires. Pour des combustibles plus lourds tels que le kérosène, cette complexité est encore accrue et 225 espèces évoluent selon 3493 réactions élémentaires [124]. En CFD, afin de tirer profit de la richesse des informations contenue dans un schéma cinétique, l'intégralité des N_{sp} espèces qu'il implique doit être transportée et l'équation 3.30 doit être résolue autant de fois. De plus, plus le schéma est riche, plus la gamme des échelles chimiques spatio-temporelle qu'il décrit est vaste et plus les équations de la forme 3.30

sont raides dans l'espace, impliquant des maillages extrêmement fins, et dans le temps, limitant le pas d'intégration numérique à des valeurs excessivement petites (c.f. § 3.3.1.3). Les capacités de calculs disponibles deviennent très rapidement un facteur limitant l'utilisation des mécanismes cinétiques détaillés dans un code CFD. A l'heure actuelle, en 3D, seule la combustion H_2 /air a pu être étudiée dans ses détails les plus fins [87, 76], grâce au nombre limité d'espèces et de réactions que sa description nécessite.

Différentes approches dédiées à l'intégration numérique des systèmes chimiques raides ont été proposées [90, 65, 107, 75], mais elles ne permettent pas de contourner le problème inhérent au coût prohibitif. La réduction des mécanismes apparaît donc comme une étape nécessaire à leur prise en compte dans la simulation numérique de la combustion. La stratégie consiste alors à identifier les espèces et les réactions élémentaires qui n'apportent pas d'informations jugées essentielles. De plus, pour un schéma cinétique donné, des approches mathématiques, consistant en une analyse du comportement des équations différentielles de la chimie, ou physiques, basée sur une extension du comportement chimique des flammes laminaires au comportement local des flammes turbulentes, permettent à leur tour d'éliminer une autre couche de la complexité liée à la prise en compte de la chimie. Elles proposent toutes un éclairage particulier sur les processus cinétiques. La section 4.3 est dédiée entièrement aux méthodes de réduction de la complexité de la thermochimie fondées sur des hypothèses physiques. Dans les deux prochaines sections, on présente les stratégies de réduction des schémas cinétiques détaillés et une approche visant à simplifier la description du comportement de tels systèmes.

4.2.2 Réduction des schémas cinétiques

L'objectif des méthodes de réduction des schémas cinétiques est de diminuer le nombre d'espèces et de sous-réactions, tout en conservant leur représentativité dans un domaine de richesse, de température et de pression plus réduit, mais correspondant aux conditions thermochimiques rencontrées dans une configuration donnée. Ils permettent d'aborder numériquement la description des écoulements turbulents réactifs avec une prise en compte des effets de la cinétique chimique, dans des configurations qui, même si elles ne sont pas encore de complexité industrielles, s'éloignent petit à petit des configurations académiques et des problèmes canoniques. Toute la pertinence des méthodes de réduction de la chimie réside dans le choix des informations que l'on souhaite conserver ou de celles que l'on peut négliger et la validité d'un schéma réduit est soumise à la vérification de critères choisis a priori. En fonction du nombre de réactions et d'espèces que l'on choisit de conserver, différents degrés de précision peuvent être obtenus ; principalement deux types de mécanismes sont ainsi construits :

- **les mécanismes squelettiques**, qui contiennent en général une centaine de réactions impliquant plusieurs dizaines d'espèces, sont obtenus à partir de schémas cinétiques détaillés, en introduisant différentes approximations. L'approximation des états quasi-stationnaires [5] (AEQS) permet d'exclure certaines espèces du schéma détaillé en supposant que leur taux de création et de destruction s'annulent. Leur concentration et taux de production peuvent alors être déduits de simples relations algébriques. L'approximation des équilibres partiels (AEP) permet la simplification des expressions algébriques issues de l'application de l'AEQS. La méthode de calcul de perturbation singulière [67] (CSP pour *Computational Singular Perturbation*) permet d'identifier automatiquement toutes les espèces en état d'équilibre et donc calculables algébriquement. Ce type de mécanisme a notamment été utilisé dans des simulations numériques directes 2D [28] ;
- **les mécanismes globaux**, qui décrivent les évolutions de quelques espèces majoritaires dans moins de dix réactions. Les coefficients paramétrant ces réactions sont en général calculés de manière à

retrouver des paramètres globaux comme la vitesse de la flamme S_L^0 , pour une combustion de type propagatif en prémélangé, ou le délai d'auto-inflammation τ_{ig} . L'utilisation de ce type de mécanisme dans des DNS est beaucoup plus fréquente, compte-tenu du faible nombre d'espèces impliquées [23, 81, 121, 109, 110].

4.2.3 Réduction de la complexité des systèmes dynamiques thermochimiques : l'approche ILDM

4.2.3.1 Principes

La principale limite de l'approche par réduction des schémas cinétiques réside dans le fait que les hypothèses d'équilibre partiel ou d'état stationnaire sont, ensuite, inévitablement appliquées à des gammes de compositions, de températures et de pression où elles ne sont plus valides.

Pour s'affranchir de ces inconvénients, Maas et Pope [77] ont développé une méthode de réduction mathématique qui permet de déterminer les réactions proches de l'équilibre partiel et les espèces proches de l'état stationnaire quelque soit les conditions thermochimiques considérées. La méthode ILDM (Intrinsic Low-Dimensional Manifolds) est basée sur une analyse des valeurs propres de la matrice jacobienne du système réactionnel c'est-à-dire sur une analyse des échelles de temps caractéristiques associées à chaque réaction. Il a été montré qu'il est possible de déterminer, dans l'espace des compositions (dont chacune des N_{sp} directions est une concentration associée à une espèce), un sous-espace attracteur de dimension N_{mani} très inférieure ($N_{mani} < N_{sp}$), dans lequel toutes les trajectoires chimiques possibles convergent après un certain temps, appelé temps de coupure τ_c . La signification est la suivante : si le système chimique est dans un état appartenant à cet attracteur, alors l'évolution du système en partant de ce point est nécessairement contenue dans l'attracteur, les mouvements sur des trajectoires en dehors correspondant à des réactions chimiques rapides que l'on ne considère pas, leur temps caractéristiques étant inférieurs à τ_c . Ce paramètre τ_c est fixé de façon à trouver un compromis entre complexité de calcul et importance des informations à en extraire. En effet, plus τ_c est grand, plus les dimensions du problème sont réduites, la précision des informations que l'on pourra extraire diminuant conjointement. Une base de données peut être construite à partir des coordonnées réduites (c'est-à-dire les vecteurs de bases du sous-espace) pour lesquelles on résout les équations de transport. Toutes les grandeurs thermochimiques associées sont tabulées, ce qui permet un gain de temps de calcul considérable, la chimie étant résolue a priori. La méthode ILDM appliquée à la simulation de flammes planes de H₂/O₂ laminaires de prémélangé [78] montre des résultats en concordance avec ceux donnés par une chimie détaillée. Le sous-espace attracteur utilisé est de dimension 3 (2 dimensions pour la variable d'avancement et 1 pour l'enthalpie). Selon les auteurs, l'implémentation de la méthode ILDM permet de réduire les temps de calcul d'un facteur 10 avec des erreurs sur les vitesses de flammes de moins de 3% ; sa pertinence est donc indiscutable. De surcroît, Maas et Thévenin [79] ont montré que malgré le fait que les processus turbulents perturbent la chimie, le nombre de variables nécessaires pour décrire l'état du système via la méthode ILDM peut être réduit d'un facteur supérieur à 2 dans le cas de la combustion turbulente de l'hydrogène dans l'air (9 espèces et 37 réactions élémentaires).

La diffusion différentielle des espèces peut faire évoluer le système réactionnel à l'extérieur de cet attracteur. Afin de garantir le fait que la variété contienne les trajectoires chimiques même perturbées par la diffusion, Bykov et Maas [8] ont proposé récemment une correction des termes de diffusion de

manière cohérente avec les hypothèses de l'approche ILDM, c'est-à-dire que l'on néglige, dans l'espace des réduit, les composantes du vecteur de diffusion selon les directions associées aux processus rapides. La méthode est renommée REDIM (Reaction-diffusion manifolds) et nécessite le stockage d'une matrice de projection en chaque point de la variété en plus du stockage de la matrice jacobienne du système.

4.2.3.2 Validité et perspectives

Cependant, la projection de l'espace des composition vers l'espace attracteur s'accompagne inexorablement d'une perte d'informations qui ne peuvent être négligées pour certaines applications. Gicquel *et al.* [41, 40] en montrent trois limites :

- la méthode ILDM ne représente correctement que les phénomènes plus « lents » que l'échelle de temps de coupure utilisée pour construire le sous-espace attracteur. Cependant, les échelles de temps caractéristiques de la turbulence peuvent être très petites et limiter la validité de l'association DNS/ILDM ;
- la tabulation correspond à des valeurs constantes des fractions massiques atomiques des éléments présents dans le système chimique, c'est-à-dire à un rapport d'équivalence constant sur tout le domaine. Cependant, si l'on considère des coefficients de diffusion différents pour chaque élément, cette propriété n'est plus vérifiée et les variations spatiales du rapport d'équivalence sont à prendre en compte ;
- les zones de basses températures de la flamme sont mal décrites. Les réactions chimiques y ont, pour la plupart, des cinétiques très raides et ne peuvent être décrites avec un nombre de paramètres aussi faible que dans les zones de hautes températures. En effet, la qualité de la réduction par cette approche est préservée lorsqu'on peut légitimement négliger certains processus chimiques par rapport à d'autres en comparant leurs échelles de temps caractéristiques respectives. Pour de faibles températures, la gamme des échelles de ces temps est bien moins étendue et il devient difficile de discerner les phénomènes lents des phénomènes rapides : l'hypothèse de découplage devient difficile à justifier. De plus, dans le cas général, contourner ce problème en proposant une prolongation linéaire des fractions massiques pour les basses températures dans l'espace des compositions aboutit à de très mauvaises prédictions des vitesses de flamme.

Pour combler ces lacunes, Gicquel *et al.* [40] et van Oijen *et al.* [119], ont proposé une formulation alternative qu'ils ont nommée Flame Prolongation of ILDM (FPI) ou Flamelet Generated Manifold (FGM), dédiée initialement à la simulation de la combustion prémélangée. Son principe, exposé dans la section suivante, a ouvert un champ de recherche porteur dans la simulation numérique de la combustion turbulente. Il est basé sur la théorie des flammelettes, dont on présentera brièvement les tenants et aboutissants, et s'appuie sur une technique de tabulation qui sera elle aussi introduite.

4.3 De la théorie des flammelettes à la tabulation de la chimie

4.3.1 Théorie des flammelettes et diagramme de la combustion établie en prémélangé

Proposé au milieu des années 70 par Bray [7] et Williams [128], le principe de base est d'abord appliqué aux flammes laminaires puis étendu aux flammes turbulentes. L'idée fondamentale est assez in-

tuitive : il s'agit d'assimiler le front de flamme réel (laminaire ou turbulent) à une collection de flammes élémentaires, appelées flammelettes, supposées laminaires et indépendantes. Le comportement de ces flammelettes est assimilé à celui d'une flamme modèle, à déterminer *a priori*. L'un des objectifs essentiels de cette formulation est donc de découpler les calculs de la thermochimie locale de celui de la turbulence.

Bien entendu, la validité de l'hypothèse par flammelettes est sujette à des restrictions et son utilisation doit être, en théorie, justifiée par la vérification des certaines contraintes physiques. Elles correspondent à des critères imposés conjointement aux dimensions caractéristiques de la mécanique des fluides et de la thermochimie que l'on a introduites dans la sous-section 3.2.3.3. Le diagramme de Borghi présenté sur la figure 4.1 permet, en première approche purement cinématique, de déterminer dans que mesure la turbulence affecte la structure d'un front de flamme prémélangé. Le rapport sans dimension de l'échelle intégrale l_t sur l'épaisseur thermique de la flamme δ_{th} figure en abscisse sur ce diagramme. $l_t/\delta_{th} \gg 1$ correspond à la limite où l'échelle caractéristique du mélange est très grande devant l'épaisseur de la flamme et où l'écoulement courbe géométriquement le front de flamme, sans en modifier la structure. Lorsque ce rapport diminue, les tourbillons commencent à perturber la zone de préchauffage, puis la zone de réaction. En ordonnées, le rapport sans dimension u'/S_L compare la vitesse caractéristique des échelles du mélange, représentée par l'écart-type des fluctuations de vitesse, avec la vitesse de propagation du front de flamme de prémélange. $u'/S_L \gg 1$ représente une limite où le mouvement de la flamme est gelé du point de vue de l'écoulement.

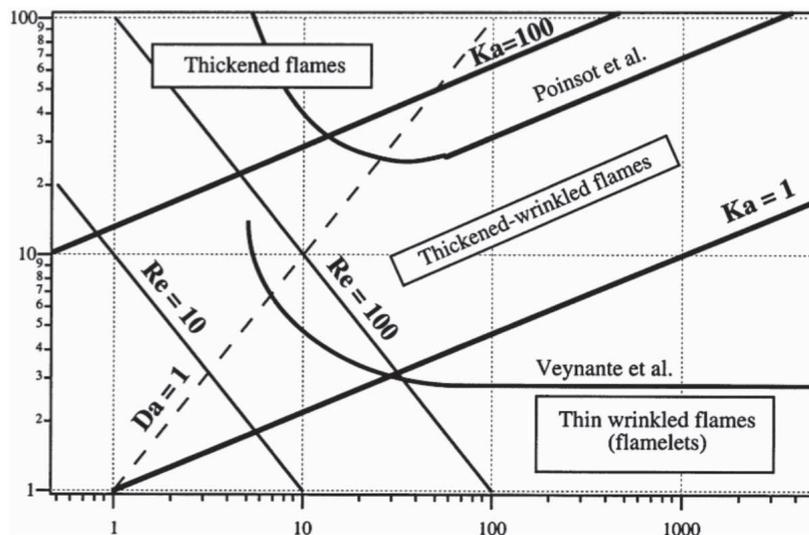


FIGURE 4.1 – Diagramme de Borghi, Destriau et Peters, extrait de [122] ; abscisse : $\log l_t/\delta_{th}$; ordonnée : $\log u'/S_L$

Pour évaluer la validité de l'hypothèse des flammelettes, on doit caractériser l'impact de la turbulence sur le front de flamme de prémélange. Cette hypothèse est valide, si et seulement si la dynamique des plus petites échelles de l'écoulement, les échelles de Kolmogorov, ne perturbe pas celles du front de

flamme. Le nombre de Karlovitz est défini de façon à comparer ces deux dynamiques,

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_k} = \frac{\delta_{th}}{l_k} \frac{u_k}{S_L}, \quad (4.1)$$

que l'on peut réécrire, en utilisant la relation 3.53, comme

$$\frac{u'}{S_L} = \frac{Ka}{\sqrt{Re_t}} \frac{l_t}{\delta_{th}}. \quad (4.2)$$

Ka apparaît dès lors comme un nombre clef pour délimiter le domaine de validité de l'hypothèse des flammelettes dans le diagramme de Borghi :

- Si $Ka \ll 1$, la dynamique des structures de Kolmogorov n'impacte pas celle du front de flamme de prémélange et l'hypothèse des flammelettes est justifiée ;
- Sinon, la turbulence modifie la structure du front de flamme qui ne peut plus être assimilé localement à une flammelette indépendante de l'écoulement et l'hypothèse des flammelettes ne tient plus.

4.3.2 L'hypothèse des réacteurs homogènes et diagramme des régimes d'auto-inflammation en homogène

Parmi les approches présentées dans le chapitre 2, les modélisations de la thermochimie de l'auto-inflammation CAI/HCCI par le modèle multi-zones et par la méthode de tabulation des réponses de réacteurs homogènes sont basées sur la même hypothèse : l'impact de la diffusion de la température (ou de l'enthalpie) dans une zone pour le premier cas, ou de la diffusion de la variable d'avancement dans une maille pour le second, est négligeable sur l'évolution de la thermochimie. En formulant autrement, on suppose que les champs associés aux quantités thermochimiques sont homogènes dans la zone ou dans la maille considérée.

Le nombre de Damköhler est défini comme le rapport d'un temps caractéristique du mélange, identifié au temps intégral, sur un temps chimique, qui peut être assimilé au délai d'auto-inflammation τ_{ig} en première approche,

$$Da = \frac{\tau_m}{\tau_c} = \frac{\tau_t}{\tau_{ig}}. \quad (4.3)$$

Si $Da \gg 1$, les mécanismes de la cinétiques chimiques sont beaucoup plus lents que les processus de mélange. La dynamique de la combustion est alors pilotée par la chimie. Cette condition est nécessaire à la validation de l'hypothèse des réacteurs homogènes.

L'auto-inflammation n'entre pas dans le paradigme du diagramme de Borghi. Les processus thermochimiques qui la définissent étant instationnaires par nature, elle n'entre pas dans la catégorie de la combustion établie : durant toute la phase d'initiation, il n'existe pas de front de flamme. Et comme on l'a montré dans le chapitre 2, même lorsqu'un front de propagation se développe, il n'existe pas de longueur ou de vitesse caractéristiques uniques permettant de décrire simplement la cinématique du phénomène. Une approche différente doit donc être imaginée afin de délimiter les régimes d'auto-inflammation CAI/HCCI dans un diagramme. La construction d'un tel diagramme sera discutée dans le chapitre 5.

4.4 La tabulation de la thermochimie

4.4.1 Présentation du problème de la tabulation

Le but de la tabulation, comme celui des stratégies présentées dans la section précédente, est donc de réduire la complexité de la thermochimie, afin de pouvoir simuler le comportement de la combustion dans des systèmes réels. Concrètement, la tabulation de la chimie doit permettre :

1. de réduire le nombre d'espèces transportées, nécessaires à la description de la thermochimie de la combustion turbulente, en introduisant des quantités effectives. A cette occasion, des hypothèses de modélisation seront introduites ;
2. de modéliser les termes sources chimiques associés aux nouvelles quantités effectives transportées selon une équation de type 3.30, ainsi que de dégagement de chaleur chimique dans l'équation 3.27 ;
3. de fournir, durant le calcul de combustion turbulente dans une configuration donnée, toutes les informations thermochimiques jugées nécessaires par l'utilisateur, ingénieur ou chercheur.

A la base des méthodes de tabulation réside une hypothèse portant sur les interactions thermo-chimie/turbulence ; en effet, leur utilisation présuppose, dans le cas d'une combustion établie que le régime des flammelettes ($Ka \ll 1$) est représentatif du comportement de la flamme, ou dans le cas de l'auto-allumage, que le comportement de la combustion entre dans le régime des réacteurs homogènes ($Da \gg 1$). Il reste alors à postuler un comportement modèle pour ces briques élémentaires de combustion, flammelettes ou réacteur. Le choix est guidé par les propriétés du mélange dans le système étudié :

- si le combustible et le comburant sont prémélangés et que la combustion est établie, on a recours au modèle de flamme de prémélange stationnaire 1D ;
- si le combustible et le comburant sont injectés séparément, le mélange présente des hétérogénéités de composition et on utilise alors le modèle des flammes de diffusion stationnaires 1D, ou instationnaires 1D si l'on souhaite décrire des effets de variation temporelle d'enthalpie, ou la contribution du phénomène d'auto-inflammation ;
- dans le cas où l'on souhaite modéliser l'auto-allumage en milieu homogène, on emploie le modèle du réacteur parfaitement prémélangé ou Perfectly Stirred Reactor (PSR) 0D ;
- d'autres modèles hybrides permettent d'approcher des dynamiques de combustion intermédiaires.

Dans ces configurations archétypiques, l'évolution du vecteur d'état thermochimique, noté Ψ et possédant $N_{sp}+2$ composantes, est décrite par des formes simplifiées des équations générales de la mécanique des fluides réactifs (*c.f.* section 3.2.2), et sont obtenues en traduisant en termes mathématiques les hypothèses de laminarité et/ou d'homogénéité qui définissent le modèle.

Les interactions entre l'aérodynamique et la thermochimie sont donc grandement simplifiées ; leur contribution est prise en compte par l'intermédiaire de paramètres (par exemple des taux de dissipation scalaire) apparaissant explicitement dans les équations d'évolution. A cette étape, si l'on a fortement simplifié l'aérodynamique du problème, la description du système thermochimique demeure complexe. D'une part, la dimension de l'espace des phases est toujours aussi importante, et d'autre part, certaines espèces impliquées dans le schéma cinétique ont des temps d'évolution très courts, ce qui rend l'intégration numérique de leur équation de transport délicate et excessivement coûteuse durant la simulation de la combustion turbulente.

En remarquant que les équations d'évolutions de ces configurations modèles peuvent être résolues indépendamment, il devient possible de stocker dans des tables les informations dont on a besoin pour modéliser dans chaque maille le comportement 3D réel de la combustion turbulente. Pour entrer dans ces tables et utiliser les informations qu'elles contiennent (*i.e.* les composantes de Ψ) par interpolations en cours de calcul 3D, leurs paramètres d'entrée doivent être déterminés. Pour ceux dont on peut écrire les équations de transport, les champs 3D sont obtenus par intégration numérique, en parallèle à celles des équations de la mécanique des fluides. Les autres sont reconstruits à partir des quantités transportées. Tous ces paramètres d'entrée forment les composantes du vecteur d'état thermochimique réduit, que l'on notera Φ . La technique de tabulation est donc d'autant plus efficace que le nombre de composantes de Φ , le vecteur d'état réduit, est faible devant les $N_{sp}+2$ composantes de Ψ , le vecteur d'état thermochimique de l'archétype. Le principe de la tabulation est récapitulé dans la figure 4.2.

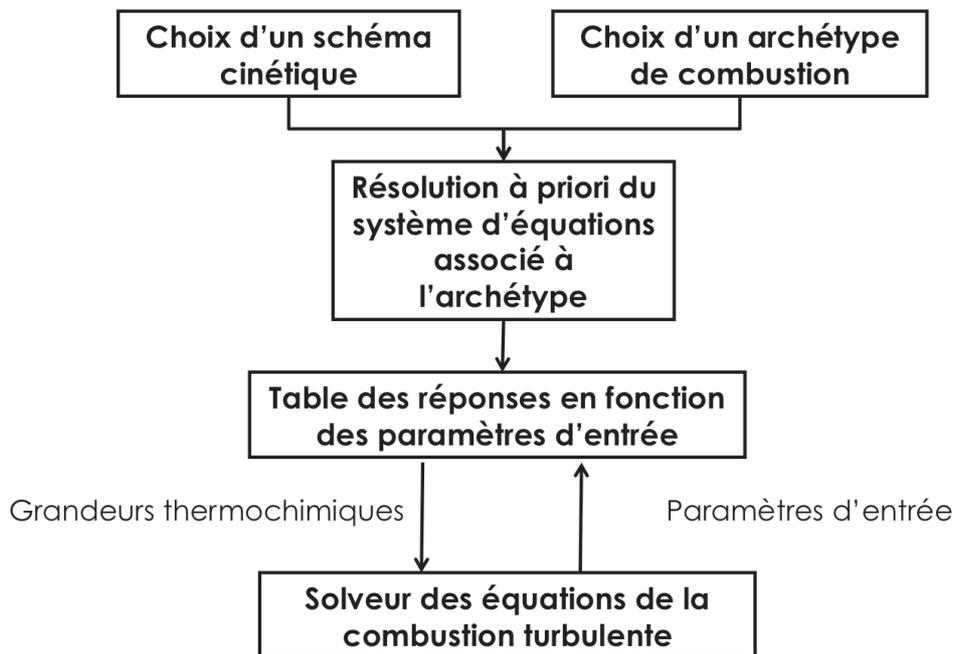


FIGURE 4.2 – Principe de la résolution de la chimie par une technique de tabulation

Naturellement, pour que la tabulation ait un sens, l'espace des phases réduit doit être injectif avec l'espace des états thermochimiques associés à l'archétype choisi pour modéliser la dynamique de la combustion : à un point de l'espace réduit doit correspondre un, et un seul, état thermochimique. La construction de l'espace des phases réduit apparaît donc comme la clef de voûte de la méthode de tabulation.

4.4.2 Espace des phases réduit

Dans cette section, après avoir présenté une définition de l'espace des phases réduit découlant directement des propriétés mathématiques des équations d'évolutions associées aux archétypes de combustion, et montré les limites que son utilisation numérique implique, les différents pa-

ramètres utilisés dans le cas général pour construire l'espace des phases réduit, et constituant donc les entrées dans les tables, seront introduits. Puis, à l'occasion d'un exposé des différentes configurations archétypiques utilisées pour modéliser le comportement réel de la combustion, d'autres paramètres plus spécifiques seront présentés. Dans la suite, les grandeurs associées aux archétypes seront annotées a .

4.4.2.1 Introduction : construction naïve

Les archétypes introduits précédemment sont des systèmes dynamiques qui, pour des conditions initiales et/ou limites données, n'admettent qu'un, et un seul, état thermochimique. On pourrait donc naïvement choisir d'identifier les composantes de Φ au temps et/ou à l'espace dans lequel (lesquels) la thermochimie associée à ces archétypes évolue, ainsi qu'aux conditions initiales $\Psi_{t_a=0}$ et/ou limites $\Psi_{x_a=x_{limite}^i}$, où $i = 1, \dots, N$ est l'indice associé à une des N limites du problème,

$$\Phi = (\mathbf{x}_a, t_a, \Psi_{x_a=x_{limite}^i}^T, \Psi_{t_a=0}^T)^T. \quad (4.4)$$

Cependant, en procédant de la sorte, la mise en oeuvre de la technique de tabulation rencontre une difficulté technique de taille. En effet, en vertu du principe de tabulation, il faudrait être en mesure de déterminer les équations de transport des coordonnées d'espace et/ou de temps attachées à l'archétype (\mathbf{x}_a, t_a) , dans le système de coordonnées spatio-temporelle (\mathbf{x}, t) dans lequel le solveur dédié à la mécanique des fluides réactifs intègre les équations. En l'abordant sous cet angle, la tabulation se montre difficile à mettre en oeuvre dans un calcul 3D turbulent. Cette limitation peut, néanmoins, être contournée en exploitant la structure temporelle et/ou spatiale simple des archétypes ; elle permet des changements de variable judicieux.

Afin de rendre la technique de tabulation applicable, on peut en effet étudier de manière équivalente la thermochimie des archétypes dans un espace homéomorphe à l'espace physique qui leur est attaché, et donc, par transitivité, à l'espace des états thermochimiques. L'étude de la combustion dans les espaces associés à la variable d'avancement c ainsi qu'à la fraction de mélange \mathcal{Z} a été adoptée dans cette optique. c et \mathcal{Z} ont initialement été définies en rapport avec des cas limites de mélange ; ces deux grandeurs sont introduites dans la suite. En particulier, on montrera comment l'introduction de la variable d'avancement permet d'apporter une solution à l'intégration numérique délicate et coûteuse des équations de la thermochimie.

4.4.2.2 Fraction de mélange

Dans le cas où le combustible et le comburant sont initialement séparés, l'un diffusant dans l'autre au niveau de leur interface, la fraction de mélange \mathcal{Z} est utilisée pour mesurer l'état du mélange, généralement entre deux compositions, la première étant associée au combustible et la seconde, au carburant. Elle est définie à partir de scalaires conservés, les éléments atomiques, de façon à ce que son transport ne fasse intervenir aucun terme de production ou destruction chimique. Si les effets de diffusion différentiels sont négligés, c'est-à-dire si l'hypothèse de nombres de Lewis tous unitaires est faite, c'est un scalaire passif dont le transport est décrit par l'équation 3.32. Peters [99] ou encore Williams [129] proposent la définition suivante,

$$\mathcal{Z} = \frac{rY_F - Y_O + Y_{O,0}}{rY_{F,0} + Y_{O,0}}, \quad (4.5)$$

où r est le coefficient stœchiométrique massique, $Y_{F,0}$ (*resp.* $Y_{O,0}$) est la fraction massique de combustible dans l'écoulement de combustible (*resp.* de comburant dans l'écoulement de comburant) et Y_F

et Y_O , les fractions massiques locales de combustible et de comburant. Par définition, Z vaut donc 0 dans l'écoulement d'oxydant et 1 dans l'écoulement de combustible. Dans le cas où les effets de diffusion différentiels sont décrits, Z n'est plus un scalaire passif et un terme source rendant compte de ce phénomène doit être ajouté à l'équation 3.32¹.

4.4.2.3 Variable d'avancement

Dans le cas où le milieu est parfaitement prémélangé avant tout processus de combustion stationnaire ou instationnaire, la variable d'avancement ou de progrès est définie de façon à mesurer l'état d'avancement de la réaction de combustion. Son utilisation peut être étendue à d'autres régimes de combustion, comme on le verra par la suite. Lorsqu'elle est normalisée de façon à être nulle dans les gaz frais et à valoir 1 dans les gaz brûlés, on la note c ; sinon, elle est notée Y_c . Son transport est décrit par une équation aux dérivées partielles de type convection/diffusion/réaction (*c.f.* équation 3.30). Y_c est généralement définie à partir de scalaires réactifs, comme la température ou les fractions massiques, ou molaires, d'espèces chimiques intervenant dans les réactions de la combustion. Plusieurs définitions ont jusqu'à maintenant été proposées pour Y_c pour des applications à la combustion des hydrocarbures. Elle est définie comme une combinaison linéaire des fractions massiques des espèces impliquées dans le schéma réactionnel,

$$Y_c = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \alpha_k Y_k, \quad (4.6)$$

Le choix des coefficients α_k est motivé par plusieurs contraintes :

- l'espace des phases réduit doit être homoéomorphe à l'espace des états thermochimiques associés à l'archétype. Cette contrainte se traduit par une condition de bijectivité entre Y_c et l'espace et/ou le temps attaché à l'archétype ;
- la réaction de combustion fait intervenir des espèces dont les échelles spatiales et/ou temporelles d'évolution peuvent être extrêmement petites, ce qui implique des pas de temps d'intégration numérique très petits et donc, un coût de calcul très important. Ce problème est résolu si l'on arrive à exprimer l'avancement global de la réaction de combustion en fonction d'une variable d'avancement dont les échelles caractéristiques sont plus grandes. C'est la raison pour laquelle cette variable d'avancement est, en général, définie comme une combinaison linéaire des fractions massiques d'espèces lentes : de cette façon, l'intégration numérique de son équation de transport n'impose pas de limitation trop importante du pas de temps, ni de maille trop petites ;
- pour limiter la sensibilité des tables aux paramètres d'entrée, les trajectoires des états thermochimiques dans l'espace des phases réduit doivent être « suffisamment régulière ». On verra que ce critère dépend des phénomènes dont on souhaite rendre compte à travers la modélisation par tabulation et que l'on souhaite donc suivre par l'intermédiaire de Y_c .

4.4.2.4 Conditions initiales et/ou limites

Quelque soit l'archétype de combustion utilisé, son évolution est nécessairement associée aux conditions thermochimiques initiales et/ou limites :

- les conditions aux limites sont définies, d'une part par les conditions thermochimiques des gaz frais, c'est-à-dire, pour une composition fixée par Z , à l'état thermodynamique et chimique du

1. Une technique basée sur une correction du terme de diffusion de Z tabulée dans le cas de flammes de prémélange stationnaires est proposée par Suresh Nambully dans son rapport de thèse [92]

système à $Y_c = 0$ (ou $c = 0$), et d'autre part, par ces mêmes conditions dans les gaz brûlés, à l'équilibre, à $Y_c = Y_c^{eq}$ (ou $c = 1$);

- les conditions initiales sont les conditions thermochimiques des gaz frais (*i.e.* à $Y_c = 0$ ou $c = 0$). Leur détermination nécessite l'utilisation d'une propriété de conservation vérifiée par les archétypes. En effet, dans ces configurations modèles, la combustion est supposée se produire soit à pression constante, soit à volume constant. De plus, pour un système fermé et adiabatique, on montre que :
 - si la pression est constante, alors l'enthalpie est conservée ;
 - si le volume est constant, alors l'énergie interne est conservée.
 En utilisant cette caractéristique, on montrera, dans la section 5.4.4, qu'il est possible de remonter aux conditions initiales de l'archétype, en utilisant uniquement les quantités transportées.

Dans la suite, le vecteur des conditions thermodynamiques initiales et/ou limites sera noté, de manière générique, Ψ_0 ($\Psi_0 = (P, T)^T$ ou définitions équivalentes) et les quantités associées aux gaz frais (*resp.* aux gaz brûlés) auront la mention u (*resp.* b).

4.4.3 Différentes approches pour définir la variable d'avancement

La variable d'avancement, on l'a vu, est généralement définie comme une combinaison linéaire des fractions massiques des espèces lentes. Pour assurer l'équivalence entre la description dans l'espace et/ou dans le temps et la description selon c (ou Y_c), la bijection entre ces deux espaces doit être vérifiée. Enfin, il est important que la sensibilité des tables aux paramètres d'entrée soit faible, de façon à limiter la propagation d'erreurs numériques liées à l'utilisation d'une thermochimie tabulée. Concrètement, les pentes des quantités thermochimiques tabulées dans l'espace des phases réduit doivent être bornées et contrôlées. En conséquence, on verra dans ce qui suit que la définition de la variable d'avancement est orientée par les phénomènes dont on veut rendre compte. En effet, les phénomènes ayant lieu dans le front de flamme ne peuvent pas être suivi de la même façon que les phénomènes ayant lieu au voisinage de l'équilibre, dans les gaz brûlés.

Pour décrire la thermochimie d'une flamme de prémélange stationnaire (*c.f.* § 4.4.4.1) dans le domaine où le dégagement de chaleur est vif, au coeur du front de la flamme, Fiorina *et al.*[34, 35] définissent Y_c comme

$$Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}. \quad (4.7)$$

Le problème de cette définition vient du fait que les phénomènes ayant lieu postérieurement au dégagement de chaleur principal ne peuvent être représentés. Par exemple, les mécanismes de formation des oxydes d'azote thermiques s'activent à de hauts niveaux de température, dans un domaine proche de l'équilibre dans lequel Y_c défini par la relation 4.7 n'évolue plus du tout, violant la condition de bijectivité que doit vérifier Y_c sur l'espace (ou le temps). Pour contourner cette limitation sur le suivi des NO_x , toujours pour une chimie supposée stationnaire, Godel *et al.*[43] proposent la définition suivante

$$Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2} + (Y_{H_2O} - Y_{H_2O}^u) + Y_{NO} + Y_{NO_2} + Y_{N_2O} + \Delta Y_{N_2}. \quad (4.8)$$

L'extension de ces définitions à des états arbitraires du mélange n'est pas toujours directe, comme souligné par Talley dans [114]. La complexité de ce problème peut être abordée de manière systématique par le biais de méthodes d'optimisation : pour ce faire, les contraintes que doit vérifier Y_c doivent être traduites sous forme mathématique.

Par exemple, dans [56], les auteurs soulignent le fait que les directions de l'espace des phases doivent être indépendantes afin de permettre des simplifications dans la modélisation des pdf de sous-maille en remarquant dans [55] que si deux variables aléatoires A et B sont indépendantes, alors la probabilité d'avoir A connaissant B s'écrit simplement

$$P(A|B) = P(A)P(B). \quad (4.9)$$

Il suffit alors de traduire ces contraintes en termes mathématiques pour exploiter la puissance des méthodes d'optimisation. Aussi, pour assurer l'indépendance entre Y_c et \mathcal{Z} , propriété supposée vérifiée dans une modélisation des contributions de sous-maille de type PCM [120], les auteurs proposent d'introduire un paramètre de flamme noté Λ dans une étape intermédiaire, tel que

$$Y_c = f(\mathcal{Z}, \Lambda). \quad (4.10)$$

Pour pouvoir éliminer Λ et exprimer toutes les grandeurs thermochimiques uniquement à partir de Y_c et \mathcal{Z} , il faut assurer l'existence de f^{-1} , c'est-à-dire la bijection entre Y_c et Λ qui peut se traduire sous la forme de l'inéquation $\partial Y_c / \partial \Lambda > \epsilon > 0$. Les auteurs ramènent alors le problème à une minimisation de la fonction de coût \mathcal{C} définie comme

$$\mathcal{C} = \int \int \Omega \mathcal{H} \left(\epsilon - \frac{\partial Y_c}{\partial \Lambda} \right) d\mathcal{Z} d\Lambda, \quad (4.11)$$

par une méthode d'optimisation classique. Ω est une fonction de pondération : elle permet de sélectionner le(s) domaine(s) où la minimisation de fonction de coût revêt une importance particulière pour l'application considérée. Le potentiel de cette méthode est ensuite éprouvé dans le cas canonique de la combustion stationnaire non-prémélangée, dont la dynamique est décrite par l'équation dite des flammelettes de diffusion stationnaires [100] (*c.f.* § 4.4.4.2). Dans ce test, le combustible est un mélange de n -heptane et de dihydrogène, leur proportion variant, et le comburant est constitué d'air ; une définition unique de la variable d'avancement est utilisée pour toutes les compositions du combustible. Les auteurs montrent que la fonction de coût, que l'on peut relier à l'erreur commise en utilisant une seule variable d'avancement, est drastiquement réduite par l'utilisation de l'optimisation mathématique. Cette approche prometteuse apparaît donc comme puissante et ses applications sont potentiellement nombreuses.

Niu *et al.* soulignent dans [95] que pour qu'une variable d'avancement puisse être pleinement utilisable numériquement, la sensibilité des grandeurs thermochimiques Ψ_k à Y_c doit pouvoir être limitée, ce qui revient à imposer la condition suivante,

$$\left| \frac{\partial \Psi_k}{\partial Y_c} \right| < \epsilon_k, \quad (4.12)$$

où ϵ_k est une majoration fixée par l'utilisateur et correspond à la pente maximum imposée à la courbe $\Psi_k = f(Y_c)$. Cette contrainte est donc plus forte que la simple contrainte de bijection. Les auteurs démontrent, ici encore, la puissance de l'optimisation qui rend possible d'automatiser la détermination d'une seule et unique variable d'avancement vérifiant la contrainte 4.12 quelque soit la gamme de richesse considérée, dans le cas canonique des flammes de prémélange stationnaires (*c.f.* § 4.4.4.1) pour la combustion méthane/air et kérosène/air ainsi des réacteurs homogènes à pression constante pour la combustion du n -heptane/air incluant des effets de flamme froide.

La construction de l'espace des phases réduit apparaît donc comme une étape préliminaire au calcul CFD de la combustion turbulente. Pour la tabulation, les définitions de Z et de Y_c sont toujours *ad-hoc* ; elles présupposent, en effet, d'associer a priori le comportement du système réactionnel à un archétype de combustion. Dans la section qui suit, on présentera, plus en détails, les différents archétypes utilisés pour modéliser le comportement de la combustion turbulente réelle.

4.4.4 Archétypes de la combustion laminaire et espace des phases

4.4.4.1 Les flammes de prémélange plane, stationnaires et non-étirées

Ici, un front de flamme (ou zone de réaction chimique intense) plan se propageant librement sépare deux zones dont les compositions sont homogènes : d'un côté, un prémélange de gaz frais est constitué de carburant et de comburant dans une proportion liée à un paramètre appelé fraction de mélange et noté Z ; de l'autre côté se trouvent les produits de combustion (ou gaz à l'équilibre) dont la composition ne dépend que de Z . C'est principalement grâce aux gradients de température et plus marginalement aux gradients de concentration des espèces existants entre les gaz frais et les gaz à l'équilibre (i.e. grâce aux flux thermiques et de masse) que le front de flamme peut se propager de proche en proche en consommant les gaz frais à une vitesse notée S_L dite vitesse de flamme laminaire non-étirée :

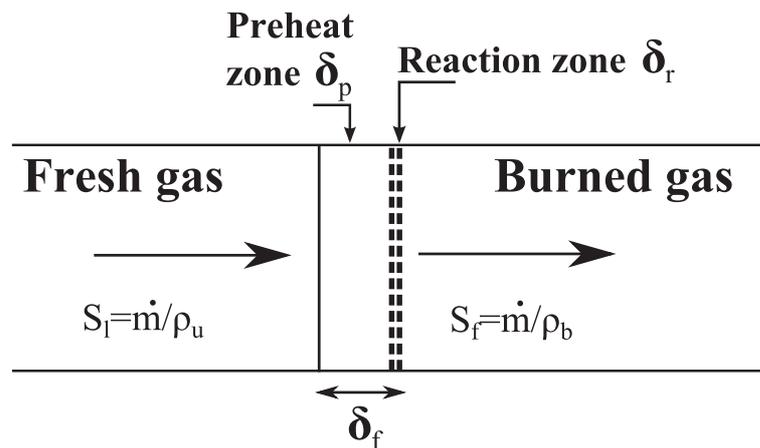


FIGURE 4.3 – Structure du front de flamme de prémélange laminaire

Dans cet archétype de combustion, les hypothèses physiques suivantes sont faites :

- stationnarité de la combustion dans ce référentiel qui implique que les compositions et conditions thermodynamiques des gaz frais et des gaz brûlés sont fixées (i.e. conditions aux limites fixées) ;
- $M < 0.3$;
- flamme plane, i.e. 1D ;
- flamme se propageant librement ;
- contributions négligeables des phénomènes visqueux ;
- combustion isobare.

Ces hypothèses permettent de définir une grandeur caractérisant la dynamique stationnaire du front de flamme, sa vitesse de propagation laminaire et sans étirement, notée S_L^0 . Elle est définie comme la vitesse des gaz frais devant le front de flamme 1D. La conservation de la masse dans ces conditions implique que

$$\rho u = \rho_u S_L^0. \quad (4.13)$$

Les équations de transport sont obtenues à partir des équations présentées dans la section 3.2.2, en leur appliquant le jeu d'hypothèse du modèle et en utilisant l'égalité 4.13. On obtient un système de $N_{sp}+2$ équations 1D qui seront utilisées dans la section 4.5. Les équations décrivent le transport des fractions massiques Y_k des N_{sp} espèces et de la température ; elles sont les suivantes [60] :

$$\rho_u S_L^0 \frac{dY_k}{dx} + \frac{d}{dx} (\rho(V_k + V_c)Y_k) = \dot{\omega}_k, \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \rho_u S_L^0 \frac{dT}{dx} &= \frac{1}{c_p} \frac{d}{dx} \left(\lambda \frac{dT}{dx} \right) - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^N h_i \dot{\omega}_k \\ &- \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^N \rho c_{pk} Y_k (V_k + V_c) \cdot \frac{dT}{dx}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

La vitesse de diffusion s'écrit :

$$V_k = -\mathcal{D}_k \frac{1}{X_k} \frac{dX_k}{dx}. \quad (4.16)$$

Les flux diffusifs de masse s'expriment comme :

$$\rho V_k Y_k = -\rho \mathcal{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{dX_k}{dx} = -\rho \mathcal{D}_k \left(\frac{dY_k}{dx} + \frac{Y_k}{W} \frac{dW}{dx} \right). \quad (4.17)$$

V_c est une vitesse de correction assurant que la masse globale est conservée (*i.e.* $\frac{d}{dx}(\rho u) = 0$) en sommant l'équation 4.14 sur toutes les espèces :

$$V_c = - \sum_{k=1}^N V_k Y_k = \sum_{k=1}^N \mathcal{D}_k \left(\frac{dY_k}{dx} + \frac{Y_k}{W} \frac{dW}{dx} \right). \quad (4.18)$$

La fraction de mélange \mathcal{Z} caractérise la composition des gaz frais u . Elle apparaît comme un paramètre du problème modèle et constitue une composante de vecteur d'état réduit. x_a , la direction spatiale du modèle peut également être assimilée à une composante de ce vecteur. Cependant, comme signalé plus haut, le lien entre la direction spatiale attachée à cet archétype et l'espace physique 3D de la simulation de la combustion turbulente ne peut pas être établi sous cette forme, vu qu'il est impossible d'écrire l'équation de transport de x_a . On ne peut donc pas l'utiliser pour la tabulation. C'est ici que la variable de progrès Y_c trouve tout son intérêt :

- définie comme une combinaison linéaire des fractions massiques des N_{sp} espèces, on obtient facilement l'équation de transport de Y_c par la même combinaison linéaire appliquée aux N_{sp} équations de transport associées ;
- Y_c est particulièrement bien adaptée à la description des réponse thermochimiques étant définie pour suivre l'avancement générale de la réaction de combustion. La projection de l'espace 1D dans l'espace de la variable d'avancement permet une représentation moins raide de l'évolution des espèces entre les gaz frais (*i.e.* $Y_{c_u} = Y_c(x_a = 0)$) et les gaz brûlés (*i.e.* $Y_{c_b} = Y_c(x_a \rightarrow \infty)$). Elle se prête donc bien à la tabulation.

Le vecteur position dans l'espace des phases réduit, ou vecteur d'entrée dans les tables des flammes de prémélange stationnaires 1D, est donc défini comme.

$$\Phi^{a=PF} = (Y_c, \mathcal{Z}, \Psi_0^T)^T. \quad (4.19)$$

Ce modèle, nommé dans la littérature Flame Prolongation of ILDM (FPI), a été mis en oeuvre avec succès dans [35, 43, 88] pour aborder diverses problématiques inhérentes à la combustion turbulente dans un milieu prémélangé, ou partiellement prémélangé.

4.4.4.2 Les flammes de diffusion stationnaires/instationnaires

Pour comprendre la structure d'une flamme de diffusion laminaire, il est pratique de se ramener à la configuration typique d'une flamme de diffusion à contre-courant (*c.f.* figure 4.4).

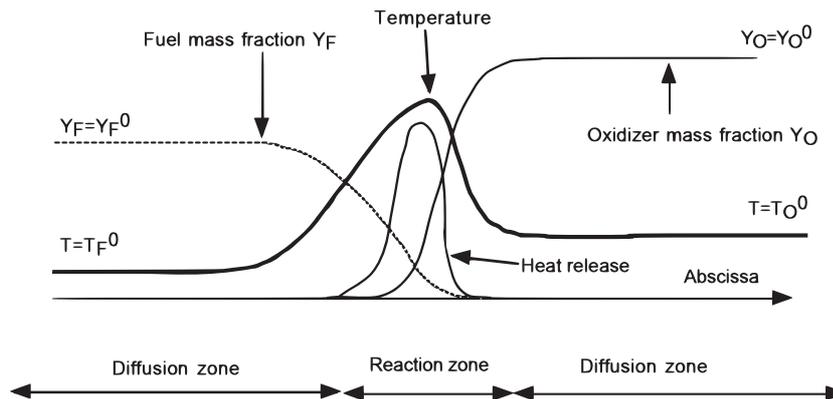


FIGURE 4.4 – Structure de la flamme de diffusion

Dans cette configuration, carburant et oxydant sont injectés à contre courant et c'est au niveau de la couche de diffusion, zone de mélange intime autour du point de stagnation, que la réaction chimique exothermique de la combustion peut avoir lieu, accrochée autour de la ligne stœchiométrique. Ici, c'est donc la diffusion des espèces chimiques qui alimente la combustion et sa vitesse contrôle le taux de réaction et l'épaisseur du front. Cette vitesse de diffusion étant dépendante des contraintes imposées par l'écoulement au niveau de l'interface entre oxydant et combustible, l'épaisseur du front de flamme est une grandeur variable qui dépend des propriétés locales de l'écoulement, contrairement à l'épaisseur du front de flamme de prémélangé se propageant librement.

Les hypothèses utilisées pour dériver les équations de transport des flammelettes de diffusion sont les suivantes [99] :

- $M < 0.3$;
- combustion isobare, l'enthalpie est donc globalement conservée ;
- $Le_k = 1$: les effets de diffusion différentielle sont négligés (*i.e.* $\rho D_k = \rho D = \lambda / c_p$) . Cette hypothèse permet de définir la fraction de mélange Z comme un scalaire passif ;
- contributions négligeables des phénomènes visqueux ;
- les phénomènes dans la direction tangentielle à l'iso-surface stœchiométrique sont négligés : la structure du front de flamme est donc unidimensionnelle.

Les équations de transport de cet archétype, dit flammelette de diffusion, sont obtenues en suivant la méthodologie suivante :

- on introduit un système de coordonnées attaché à l'iso-surface de Z à la stœchiométrie. On identifie la coordonnée spatiale perpendiculaire à cette surface à Z . Les deux autres seront associées à Z_2 et Z_3 ;

- on projette les équations 3.30 et 3.27 dans ce nouveau repère, en utilisant les hypothèses présentées si dessus ;
- en introduisant une coordonnée étirée, on peut montrer que les termes impliquant des dérivées par rapport à Z_2 et Z_3 sont quadratiques en perturbation dans la zone de réaction. On les suppose alors négligeables, ce qui revient à supposer que les effets de courbure des iso- Z sont négligeables, les phénomènes de diffusion étant prépondérant dans la direction perpendiculaire à la surface $Z = Z_{st}$.

On obtient alors le système d'équation des flammelettes de diffusion instationnaires :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{\chi_Z}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N_{sp}, \quad (4.20)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi_Z \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k. \quad (4.21)$$

Il fait apparaître le taux de dissipation scalaire $\chi_Z = \mathcal{D}|dZ/dx|^2$ qui s'exprime en s^{-1} ; il caractérise une fréquence liée à la diffusion moléculaire : il mesure donc l'intensité de la diffusion de l'espèce k .

Sous cette forme instationnaire, l'équation des flammelettes permet de décrire les phénomènes physico-chimiques suivant :

- le mélange moléculaire inerte ;
- la combustion stationnaire en régime de diffusion ;
- les phénomènes transitoires de l'auto-inflammation ;
- les phénomènes transitoires d'extinction et réallumage.

Cependant, de la même façon que pour la direction spatiale dans les flammes de prémélange stationnaires 1D, la direction temporelle ne se prête pas à la tabulation. Le problème est généralement résolu en négligeant tout simplement les phénomènes temporels² (*i.e.* les deux derniers points de la liste précédente). On obtient alors le système d'équation des flammelettes de diffusion stationnaire :

$$\frac{\chi_Z}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k = 0, \quad k = 1, \dots, N_{sp}, \quad (4.22)$$

$$\chi_Z \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 \dot{\omega}_k = 0. \quad (4.23)$$

L'équation de transport de Z s'écrit simplement et peut être intégrée numériquement en parallèle aux équations de transport de la mécanique des fluides réactifs. χ_Z peut être reconstruit à partir de Z . Le vecteur position dans l'espace des phases réduit, ou vecteur d'entrée dans les tables, associé aux flammelettes de diffusion stationnaires est donc défini comme

$$\Phi^{a=DF} = (Z, \chi_Z, \Psi_0^T)^T. \quad (4.24)$$

Cependant, ces tables ne peuvent pas rendre compte des instationnarités de la combustion et dans le cas où les phénomènes transitoires pilotent le comportement global de la combustion, on préférera

2. il est traité de façon originale par l'approche MFM (*c.f.* sous-section 4.4.4.4)

utiliser les archétypes présentés dans la suite.

Ce approche a été utilisée pour décrire le comportement de flamme de diffusion turbulente dans [69, 55, 85].

4.4.4.3 Les réacteurs homogènes parfaitement agités

La configuration archétype du PSR est obtenue par dégénérescence spatiale complète d'un écoulement 3D en 0D. Dans un réacteur homogène parfaitement agité, toutes les quantités thermochimiques évoluent de manière homogène dans l'espace qui peut alors être ramené à un point. On se trouve donc dans la limite de $Da \gg 1$, où l'évolution de la combustion est uniquement pilotée par les processus chimiques.

Une seule hypothèse de taille est donc faite ici : toutes les dépendances spatiales sont négligées dans les équations de transport générales. La convection et la diffusion ne sont pas prises en compte par ce modèle. On montre alors facilement que les équations générales de la mécanique des fluides réactifs 3.30 et 3.27 dégénèrent en

$$\frac{dY_k}{dt} = \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N_{sp}, \quad (4.25)$$

$$c_v \frac{dT}{dt} = \frac{P}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt} - \sum_{k=1}^{N_{sp}} e_{s,k} \dot{\omega}_k. \quad (4.26)$$

En général, dans les approches de thermochimie tabulée, une condition supplémentaire doit être adoptée pour limiter la taille des tables. La combustion est ainsi supposée se produire, soit à volume constant, soit à pression constante.

– à pression constante, l'équation 4.26 s'écrit

$$c_p \frac{dT}{dt} = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} e_{s,k} \dot{\omega}_k. \quad (4.27)$$

– à volume constant, l'équation 4.26 devient

$$c_v \frac{dT}{dt} = - \sum_{k=1}^{N_{sp}} e_{s,k} \dot{\omega}_k. \quad (4.28)$$

Ici encore, pour la tabulation, la dimension temporelle est remplacée par une variable d'avancement Y_c . La composition initiale du mélange (*i.e.* composition des gaz frais) peut être suivie à l'aide de la fraction de mélange \mathcal{Z} ; l'état thermodynamique des gaz frais Ψ_0 peut être déterminé, à partir des quantités connues (ρ , P , E , \mathcal{Z}), en utilisant :

- à $P = cste$, la conservation de l'enthalpie ;
- à $V = cst$, la conservation de l'énergie interne.

On décrira dans le chapitre A la méthodologie permettant d'obtenir Ψ_0 . Dans l'espace des phases réduit du PSR à pression ou volume constant, le vecteur position s'écrit encore :

$$\Phi^{a=PSR} = (Y_c, \mathcal{Z}, \Psi_0^T)^T. \quad (4.29)$$

La modélisation par tabulation de réponse de PSR pour l'étude de l'auto-inflammation en milieu turbulent a été utilisée dans [16, 39, 98, 59].

4.4.4.4 Un modèle mixte : Multidimensional flamelet-generated manifolds

Pour récapituler, dans une flamme de prémélange, les réactants sont initialement parfaitement mélangés, alors que dans une flamme de diffusion, comburant et combustible sont initialement séparés, le mélange étant supposé se produire durant la combustion. En pratique cependant, les configurations où la combustion se développe en régime partiellement prémélangé sont nombreuses. On pensera, par exemple, au développement de la flamme à travers un spray de combustible dans un moteur diesel ; c'est également en utilisant les propriétés de la combustion en prémélange partiel que les flammes de diffusion turbulente liftées se stabilisent selon le mécanisme des flammes triples. Dans ce genre d'applications où des états de mélange intermédiaires sont considérés, les flammes de prémélange et de diffusion apparaissent comme deux cas limites d'un continuum de comportements que constitue la combustion réelle. L'approche MFM proposée par Nguyen *et al.* [93] s'inscrit dans ce contexte ; ce modèle a pour objectif de proposer les améliorations suivantes :

- application aux régimes de combustion partiellement prémélangés afin d'améliorer la fiabilité des méthodes de tabulations et d'élargir leur champ d'investigation ;
- conservation des propriétés propres aux flammes de diffusion et aux flammes de prémélange et prise en compte de leurs couplages en vertu du premier point ;
- inclusion des effets d'étirement dans le comportement prémélangé.

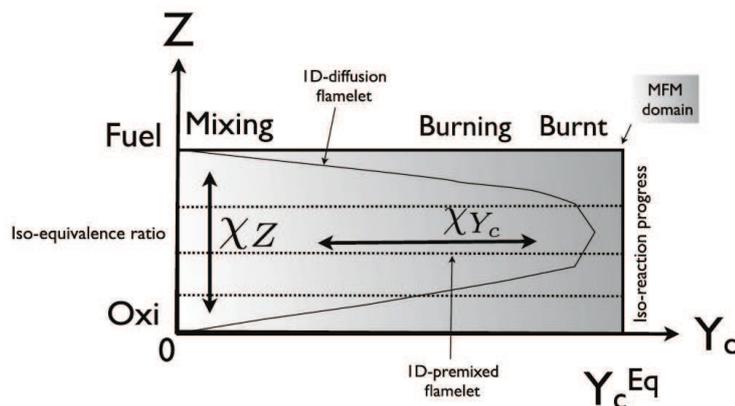


FIGURE 4.5 – Structure de la flammelette $Y_c - Z$, extraite de [93]

Dans ce papier, les auteurs proposent d'abord une formulation générale du système d'équations MFM dans un espace des phases possédant un nombre de dimensions quelconque, chaque dimension étant définie comme une combinaison linéaire particulière des fractions massiques des espèces, à l'image de Y_c et de Z . Puis, les auteurs montrent que ce système général peut dégénérer de plusieurs manières :

- en 0D, uniquement selon une variable temporelle, en un système décrivant l'évolution d'un réacteur homogène (*c.f.* § 4.4.4.3) parfaitement agité (PSR) ;
- en 1D, selon la variable d'avancement et une variable temporelle, en un système décrivant l'évolution d'une flamme de prémélange instationnaire, soumise à un étirement ;
- en 2D, selon la variable d'avancement, la fraction de mélange et une variable temporelle, en un système décrivant l'évolution d'une flamme dont les comportements limites sont le PSR et la flamme de prémélange étirée et la flamme de diffusion.

Les flammelettes $Y_c - Z$ correspondent à la formulation 2D stationnaire du système MFM. On se concentre ici sur leur structure, schématisée sur la figure 4.5. Pour une valeur fixée de Z , une flamme de prémélange 1D se développe ; son comportement peut être perturbé dans la direction Z , par les flux diffusifs qui peuvent exister si le milieu présente des inhomogénéités de composition.

Plus précisément, le système d'équation décrivant l'évolution d'une flammelette dans l'espace $Y_c - Z$ s'écrit comme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho Y_k}{\partial \tau} + \dot{\omega}_c \frac{\partial Y_k}{\partial Y_c} &= \frac{\rho \chi_{Y_c}}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Y_c^2} + \frac{\rho \chi_Z}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + 2 \frac{\rho \chi_{Y_c, Z}}{Le_k} \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Y_c \partial Z} + \dot{\omega}_k, \quad k = 1, \dots, N_{sp}, \quad (4.30) \\ \frac{\partial \rho T}{\partial \tau} + \dot{\omega}_c \frac{\partial T}{\partial Y_c} &- \frac{1}{c_p} \left(\rho \chi_{Y_c} \frac{\partial T}{\partial Y_c} + \rho \chi_{Y_c, Z} \frac{\partial T}{\partial Z} \right) \left(\frac{\partial c_p}{\partial Y_c} + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{c_{p_k}}{Le_k} \frac{\partial Y_k}{\partial Y_c} \right) \\ &- \frac{1}{c_p} \left(\rho \chi_Z \frac{\partial T}{\partial Z} + \rho \chi_{Y_c, Z} \frac{\partial T}{\partial Y_c} \right) \left(\frac{\partial c_p}{\partial Z} + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \frac{c_{p_k}}{Le_k} \frac{\partial Y_k}{\partial Z} \right) \\ &= \rho \chi_{Y_c} \frac{\partial^2 T}{\partial Y_c^2} + \rho \chi_Z \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + 2 \rho \chi_{Y_c, Z} \frac{\partial^2 T}{\partial Y_c \partial Z} - \frac{1}{c_p} \sum_{k=1}^{N_{sp}} h_k \dot{\omega}_k. \quad (4.31) \end{aligned}$$

χ_{Y_c} , χ_Z et $\chi_{Y_c, Z}$ sont respectivement les taux de dissipation scalaire de Y_c , Z et le taux de dissipation scalaire croisé de Y_c et de Z . Le passage d'un comportement de la combustion à un autre s'effectue de manière continue dans le système MFM-2D par l'intermédiaires de termes d'interactions entre régimes, pondérés par des taux de dissipation scalaire, croisés ou non. Par exemple, si l'écoulement réactif se comporte localement dans la réalité comme un PSR, on a alors $\chi_{Y_c} \rightarrow 0$, $\chi_Z \rightarrow 0$ et $\chi_{Y_c, Z} \rightarrow 0$ et le système MFM-2D dégénère naturellement en un système d'équation de PSR.

Le vecteur position associé à un état thermochimique dans l'espace des phases réduit pour les flammelettes $Y_c - Z$, c'est-à-dire le vecteur d'entrée dans les tables, est donc

$$\Phi^{a=MFM_{2D}} = (Y_c, Z, \chi_{Y_c}, \chi_Z, \chi_{Y_c, Z}, \Psi_0^T)^T. \quad (4.32)$$

4.4.4.5 Remarques sur les espaces des phases réduits

On a présenté, dans les sous-sections précédentes, les différents archétypes de combustion, ainsi que leur espace des phases réduit. Il apparaît que la variable d'avancement, Y_c , et la fraction de mélange, Z , sont systématiquement identifiées à des coordonnées du vecteur position dans cet espace. Cependant, les trajectoires y sont bien différentes d'un archétype à l'autre, pour plusieurs raisons :

- les conditions thermodynamiques sont différentes d'une configuration à l'autre. Ainsi, dans le cas des réacteurs homogènes, maintenir une pression constante ou un volume constant dans le temps aboutit nécessairement à des chemins réactionnels différents, et donc à des trajectoires différentes dans l'espace des phases, la contribution des effets de dilatation étant de première importance à pression constante, particulièrement durant la phase d'initiation de l'auto-inflammation ;
- les phénomènes de diffusion ont un impact particulièrement important sur le phénomène de propagation d'une flamme de prémélange, ils sont au centre de la dynamique des flammes de diffusion et sont tout simplement négligés dans les réacteurs homogènes 0D ;
- pour les flammelettes de diffusion instationnaires ou stationnaires, ainsi que dans l'approche MFM, Z est une variable indépendante du problème, alors que dans les autres cas, elle est un paramètre.

L'établissement d'une correspondance rigoureuse entre des tables de différentes natures n'est donc pas trivial, voire impossible. Cependant, il est possible de coupler différentes tables, afin de rendre compte de différents comportements de la combustion. Ainsi, dans [24], les auteurs utilisent des tables de flammes de prémélange stationnaires, en parallèle à des tables de PSR à pression constante. Les quantités thermochimiques modélisées correspondent à une pondération, basée sur des arguments physiques, des réponses extraites des deux tables.

4.4.4.6 Vers une résolution *in situ* des équations des flammelettes

Il est théoriquement possible d'augmenter arbitrairement le nombre de dimension de l'espace des phases réduit, autrement dit, le nombre de paramètres d'entrée dans les tables, de façon à pouvoir rendre compte d'une phénoménologie de plus en plus riche de la combustion. En pratique cependant, ajouter des paramètres d'entrée implique une augmentation de la taille des tables. Durant le calcul parallèle de la combustion turbulente, celles-ci doivent être chargées sur chaque processeur. Or, la mémoire de ces processeurs étant limitée, la taille des tables que l'on peut stocker l'est aussi, ce qui impose une importante restriction sur la quantité d'informations qu'elles contiennent. La description de la chimie par une technique de tabulation s'en trouve rigidifiée.

Une résolution *in situ*, de la même façon que dans le modèle multi-zones, pourrait apporter une solution à ce problème, le coût numérique induit demeurant, bien entendu, la principale contrainte. Cependant, en tirant profit des avantages présentés par la représentation dans l'espace des phases réduit, il peut être possible de trouver un compromis intéressant entre flexibilité et coût. Dans la section suivante, on présente une méthode, développée au cours de cette thèse, permettant d'explorer cet axe de recherche et de proposer des solutions à la résolution *in situ* des équations des flammelettes de prémélange stationnaire. Celles-ci sont projetées et résolues en Y_c et permettent de prendre en compte l'effet de l'étirement du front par la turbulence [74]. Le texte de cet article (Lodier *et al.*, [Combustion and Flame, 158(10) : 2009-2016, 2011]) est donné *in extenso* dans la section suivante.

4.5 *In situ* Flamelet generated manifold approach

4.5.1 Introduction

Numerous techniques have been discussed in the literature to reduce and parameterize the complexity of combustion detailed chemistry, the main objective is to facilitate the introduction of this latter in numerical simulations [100, 106, 40, 24, 119, 21, 8, 67]. Some of these approaches make use of pre-tabulated flame responses obtained from canonical combustion problems, as premixed or diffusion flamelets. To build tabulations, the physical-space flame solution is projected in an appropriate reduced phase space of lower dimension; burning rate and species are then read from their reduced phase space trajectories, after transporting with the flow only their controlling parameters (*i.e.* the reduced phase space coordinates values).

The species and temperature equations were solved directly in reduced phase space instead of physical-space, the solution was validated for unity Lewis number premixed flames and explored for partially-premixed flames, as triple-flame, in a two-dimensional reduced phase space (mixture fraction and progress of reaction). In the latter, both fluxes of mass and heat occurring across equivalence ratio surfaces

and across the main reaction zones were coupled in a natural manner, to reproduce partially-premixed combustion properties. The solution procedure was time dependent, accordingly the computational effort to reach a steady-state solution was non-negligible ; moreover, only the unity Lewis test case was validated and the differential diffusion drift-terms between reduced phase space and species were neglected, as usually done in flamelet reduced phase space solution. The first objective here is to investigate the exact contribution of these additional terms, to propose a methodology to introduce them in the reduced phase space solution, and finally to derive a fast solution procedure for premixed flamelets.

The reduced phase space projection is very convenient for building canonical flame solutions, mainly for two reasons. First, the reduced phase space is a frame attached to the flame acting as a zoom inside the diffusive and reactive layers, so that less mesh points are needed compared to physical-space solutions. Second, asymptotic solutions exist in reduced phase space in the limit of large mixing rate, even for intermediate radicals. These asymptotic solutions are very helpful to initialize flame solving and reduce convergence time versus physical-space solutions, where the unavoidable departure between the first guess of intermediate species profiles and their converged distribution, may lead to quite time consuming runs. However, some important issues still need to be discussed concerning such chemistry tabulation directly obtained from reduced phase space premixed flame solution. The determination of the proper reduced phase space coordinates for complex hydrocarbon fuels may not be trivial, this point is not addressed in this study, only methane vitiated-air combustion is considered for which proper coordinates have been previously derived [24]. Differential diffusion is another major point, it is an essential ingredient to reproduce the proper flame propagation speed and the exact intermediate species profiles.

Differential diffusion appears in reduced phase space in two terms. The first is a relative diffusion term between the reduced phase space coordinates and the chemical species that is solved. This differential-diffusion drift is usually neglected and it is discussed thereafter how to include it, along with a diffusive velocity correction, to ensure mass conservation with diffusion coefficients obtained with Curtiss and Hirschfelder's law [20]. The other differential-diffusion contribution is usually cast as a correction to the scalar dissipation rate of the reduced phase space coordinate, expressed via a Lewis number. It is shown that this is not enough to avoid an additional drift between the reference physical-space solution and the reduced phase space one. An alternative formalism is proposed where the reduced phase space solution perfectly matches the physical-space distribution. In the light of this result, a specific numerical treatment is discussed that allows for fast building of chemical solutions for premixed flamelets in reduced phase space directly. Another major drawback of canonical-flame based chemistry tabulations is the need to highly reduce the complexity of the reference diffusive-reactive problem, specifically to fix the boundary conditions. Fresh and burnt gases conditions are usually chosen once for all, and an *in situ* flame solution, with boundary conditions evolving according to the local flow properties, as already done in some advanced simulations [29], would tremendously improve the chemical modeling ; in principle allowing for dilution by burnt products, heat loss due to wall or radiative transfer coupled with soot, and pressure variations, to be included with precision. This point is also addressed with the description of a modeled, or canonical, flame solution fast procedure for an *in situ* flamelet-generated manifolds (IFM).

The wording 'modeled' is here essential ; indeed the physical-space gradient of the reduced phase space coordinate is needed as an input in this approach and reduced phase space solutions cannot fully supplement standalone physical-space solutions with detailed chemistry, but are rather a modeling tool

for getting fast approximate solutions. It is also important to note that this solution is only valid for the flame mode retained (here premixed) and cannot be considered as fully generic.

4.5.2 Reduced phase space canonical-flame solution with differential diffusion

4.5.2.1 Budget equations

In what follows, the diffusion coefficients \overline{D}_k are computed with the Hirschfelder and Curtiss approximation [20]. The species and temperature equations (Eq. (4.14) and Eq. (4.15)) are projected into a frame attached to the flame. This projection is applied in this study to a one-dimensional reduced phase space Y_c , which may be a reactive coordinate. The physical-space derivative may be written :

$$\frac{d}{dx} \bullet = \frac{dY_c}{dx} \frac{d\bullet}{dY_c} \quad (4.33)$$

Denoting $\frac{d}{dx} Y_c = G_c(Y_c)$, one may introduce A_i and B_i so that the diffusive flux becomes $-\rho V_i Y_i = \rho G_c A_i$, then

$$A_i = D_i \frac{dY_i}{dY_c} + B_i \quad (4.34)$$

$$B_i = D_i Y_i \frac{d \ln(W)}{dY_c} \quad (4.35)$$

The equation for Y_c takes a form similar to Eq. (4.14) and may be organized in :

$$\rho (\mathbf{u} + \mathbf{V}_a) \cdot \frac{dY_c}{dx} = \dot{\omega}_c - \frac{dY_c}{dx} \cdot \left[\frac{d}{dY_c} (\rho \mathbf{V}_c Y_c) + Y_c \frac{d}{dY_c} (\rho \mathbf{V}_a) \right] \quad (4.36)$$

Using Eq. (4.33) in Eq. (4.14), the term $\rho (\mathbf{u} + \mathbf{V}_a) \cdot \frac{dY_c}{dx}$ appears in Eq. (4.14) and is replaced by the RHS of Eq. (4.36). The same is done in the equation for T in which $\rho \mathbf{u} \cdot \frac{dY_c}{dx}$ is made explicit with Eq. (4.33), to be expressed from Eq. (4.36). After some additional manipulations making also use of Eq. (4.33), the governing equations become :

$$\left[\underbrace{\dot{\omega}_c}_{(i)} - Y_c G_c \frac{d}{dY_c} \underbrace{(\rho G_c \sum_{k=1}^N A_k)}_{(ii)} + G_c \frac{d}{dY_c} \underbrace{(\rho G_c (D_c - D_i + B_c))}_{(iii)} \right] \frac{dY_i}{dY_c} - \underbrace{\rho D_i G_c^2 \frac{d^2 Y_i}{dY_c^2}}_{(iv)} - G_c \frac{d}{dY_c} (\rho G_c B_i) + \underbrace{Y_i G_c \frac{d}{dY_c} (\rho G_c \sum_{k=1}^N A_k)}_{(v)} - \dot{\omega}_i \underbrace{= 0}_{(vi)} \quad (4.37)$$

$$\begin{aligned}
& \left[\underbrace{\dot{\omega}_c}_{(i)} - G_c \frac{d}{dY_c} \left(\rho G_c Y_c \sum_{i=1}^N A_i \right)}_{(ii)} + \underbrace{G_c \frac{d}{dY_c} \left(\rho G_c (D_c - \frac{\lambda}{\rho C_p} + B_c) \right)}_{(iii)} \right. \\
& \left. - \underbrace{\frac{\lambda}{C_p} G_c^2 \frac{d \ln(C_p)}{dY_c}}_{(iv)} - \underbrace{\frac{1}{C_p} \rho G_c^2 \sum_{i=1}^N C_{p_i} (A_i - Y_i \sum_{k=1}^N A_k)}_{(v)} \right] \frac{dT}{dY_c} \\
& - \underbrace{\frac{\lambda}{C_p} G_c^2 \frac{d^2 T}{dY_c^2}}_{(vi)} + \underbrace{\frac{1}{C_p} \sum_{i=1}^N h_i \dot{\omega}_i}_{(vii)} = 0 \tag{4.38}
\end{aligned}$$

In equations (4.37) and (4.38), the term (i) represents the evolution of the reduced phase space coordinate due to chemistry. The term (ii) appears from the diffusion correction velocity (Eq. (4.18)). The third term (iii) is representative of the differential diffusion between the Y_c - and Y_i - or T -iso surfaces.

In Eq. (4.37), (iv) is the molecular diffusion expressed in reduced phase space, (v) also comes from the diffusion correction velocity and (vi) is the chemical source of the i th species. In Eq. (4.38), (iv) and (v) are from the diffusion of temperature due to species molecular diffusion, (vi) is the temperature diffusion by conduction and (vii) the production of heat by combustion.

The terms (ii) and (v) of Eq. (4.37) and (ii) of Eq. (4.38), linked to the diffusion correction velocity, appear because $\rho \mathbf{V}_c$ is not a divergence free vector. Divergence free velocity convection has been reorganized as a material derivative acting similarly on Y_i and Y_c in above equations and are thus not present in the Y_c moving frame. It is worthwhile to note that more advanced description of molecular transport providing V_i [42] would avoid those terms ; however, most of the flame solvers are today grounded on the Fick's law associated with more or less detailed Curtiss and Hirschfelder's type expressions.

In a first approach, the diffusion coefficient of the reduced phase space variable could be taken as the thermal diffusivity, $D_c = (\lambda/\rho C_p)$. The term $\rho \mathcal{D}_i G_c^2$ would then be cast in :

$$\rho \mathcal{D}_i G_c^2 \frac{d^2 Y_i}{dY_c^2} = \frac{\rho \chi_{Y_c}}{Le_i} \frac{d^2 Y_i}{dY_c^2} \tag{4.39}$$

after introducing the scalar dissipation rate $\chi_{Y_c} = (\lambda/\rho C_p) |dY_c/dx|^2$; this strategy is sometimes adopted for tracking diffusion flamelets with a passive scalar [100]. It could also be tempting to neglect the differential diffusion terms (ii) , (iii) and (v) of Eq. (4.37), and, (ii) and (iii) of Eq. (4.38). However, to estimate the impact of these terms in the general case of a reactive coordinate used in premixed flamelets, simulations are first performed with and without including them.

The boundary conditions are those of a premixed flame (fresh gases and burnt products at chemical equilibrium) and results compared with a corresponding reference physical-space solution, projected in

Y_c -space. This can be done only once D_c has been defined ; formally if

$$Y_c = \sum_{k=1}^N \alpha_k Y_k \quad (4.40)$$

with α_k used to linearly combine the species for forming the Y_c coordinate, D_c must verify (see Eq. (6) in [93]) :

$$\frac{d}{dx} (\rho V_c Y_c) = \frac{d}{dx} \left(\sum_{k=1}^N \alpha_k \rho V_k Y_k \right) \quad (4.41)$$

leading to :

$$D_c = \left(1 + Y_c \frac{d \ln(W)}{dY_c} \right)^{-1} \sum_{k=1}^N \alpha_k A_k \quad (4.42)$$

The diffusion coefficient of the reduced phase space component is then determined.

4.5.2.2 Numerics, solution procedure and boundary conditions

As usually done for chemical system subjected to species fluxes [60], the above equations are solved with a damped Newton Raphson method, after writing the system in a vectorial form,

$$\mathbf{F}(\mathbf{Y}) = 0 \quad (4.43)$$

with $\mathbf{Y} = (Y_1, \dots, Y_N, T)$. Iterations are organized as :

$$\mathbf{Y}^{n+1} = \mathbf{Y}^n - \kappa J_{\mathbf{F}(\mathbf{Y}^n)}^{-1} \cdot \mathbf{F}(\mathbf{Y}^n) \quad (4.44)$$

where the Jacobian reads

$$J_{\mathbf{F}(\mathbf{Y}^n)}^{i,j} = (\partial F_i^n / \partial Y_j) \quad (4.45)$$

This Jacobian is approximated using the method proposed by Curtis [19] and κ is a relaxation coefficient to optimize convergence. $J_{\mathbf{F}(\mathbf{Y}^n)}^{i,j}$ is not computed at every Newton iteration, but it is kept the same till $|\mathbf{Y}^{n+2} - \mathbf{Y}^{n+1}| < 10^{-5} |\mathbf{Y}^{n+1} - \mathbf{Y}^n|$.

The first and second order derivatives ($d \cdot / dY_c$ and $d^2 \cdot / dY_c^2$) are approximated with centered differences and the Y_c -mesh is refined toward fresh gases. At the domain boundaries, species mass fractions (fresh and chemical equilibrium) and $G_c = 0$ are imposed. Because the species defining Y_c evolve while iterating, a moving mesh procedure is employed [93]. This point is essential, the Y_c coordinate is not fixed *a priori*, but is recomputed according to the Y_i -solution so that Y_c satisfies Eq. (4.40).³

A basic property of the species and temperature balance equations in reduced phase space is used to ensure rapid convergence. In the limit of large $G_c(Y_c)$ values in terms (*iv*) of Eq. (4.37) and (*vi*) of Eq. (4.38), the equations reduce to $d^2 Y_i / dY_c^2 \approx 0$ and $d^2 T / dY_c^2 \approx 0$, whose solution is a linear response versus Y_c , between fresh gases and chemical equilibrium. The solution procedure is then organized as followed :

3. The same would be true for Y_c taken as a passive scalar. To account for the differential-diffusion drift between the passive (or mixture fraction) coordinate and the vector of species solved in diffusion flamelets, it would be necessary to continuously rescale the mixture fraction coordinate according to its definition from species local values ; to authors knowledge, this is not usually done in diffusion flamelet reduced phase space solvers.

1. Starting from the two points given by a fresh gases mixture (Y_c^u, Y_i^u, T^u) and its corresponding equilibrium composition (Y_c^b, Y_i^b, T^b), an initial linear solution versus Y_c is imposed for all species mass fraction and temperature.
2. The equations are solved forcing G_c to a high value G_c^* in diffusive terms (*iv*) of Eq. (4.37) and (*vi*) of Eq. (4.38), containing d^2Y_i/dY_c^2 and d^2T/dY_c^2 , respectively. The part of the term (*iii*) of Eq. (4.37) containing $D_c d^2Y_i/dY_c^2$ (via Eq. (4.42)) is also concerned, to ensure a perfect match between Y_c and the sum of transported species defining Y_c . Typically, G_c^* should be an order of magnitude larger than the target G_c value, for which the flame solution is sought. Convergence is obtained after a single iteration, because the guessed solution is very close to the exact solution.
3. From these $Y_i(Y_c)$ and $T(Y_c)$ distributions, more iterations are conducted until convergence with $G_c^* = \beta^k G_c$, decreasing β^k down to unity :

$$\beta^k = 1 + (\beta^o - 1) \left(\frac{N_\beta - k}{N_\beta} \right)^2 \quad (4.46)$$

To reach $\beta = 1$, starting from $\beta_o \approx 10$ as an initial value, $N_\beta \approx 8$ substeps are needed. The square law refines the β evolution close to unity, where the stiff chemical terms dominate in species and temperature solved equations. Notice that this G_c relaxation is applied to terms listed in item 2 only, for the other terms the target $G_c(Y_c)$ value is taken from start.

Convergence is obtained after about 15 Newton iterations, whatever the boundary conditions. Compared to the physical-space formalism, the knowledge of an asymptotic solution for large G_c values in the diffusion terms thus constitute a great added value. Also, the amount of cpu effort required is much less than with time evolving solutions of similar systems.

A standalone reduced phase space solution is relevant only if the reduced phase space coordinate is solved separately in physical-space, to get an exact or approximate $G_c(Y_c)$ distribution. In laminar flames, the full resolution of Y_c is much less demanding in physical-space than the resolution of intermediate radical species, thus strongly reducing computing efforts. In turbulent flames, assuming thin reaction zones with a dominant direction for the gradient, $G_c = (\chi_{Y_c}/D_c)^{1/2}$ is related to the scalar dissipation rate, χ_{Y_c} , which is representative of small scale diffusion and that was shown to be, directly or indirectly, at the core of any turbulent flame modeling [122]. Therefore information on G_c is available in most turbulent combustion models.

Thereafter, this methodology is validated against physical-space solutions obtained with the PREMIX software [60]. To accurately perform the comparisons, the distribution $G_c = G_c(Y_c)$ is taken from freely-propagating laminar premixed flamelets. However, any G_c distribution, as a one influenced by turbulent eddies and micro-mixing, can in principle be imposed to solve the reduced phase space balance equations.

The mixture conditions are those of the Cabra *et al.* burner [9]. A CH₄–air fuel mixture at equivalence ratio 4 and at room temperature is mixed with an H₂O air vitiated stream at 1350 K, composed of equilibrium burnt gases originated from hydrogen/air lean premixed combustion at equivalence ratio 0.4. The stoichiometric mixture fraction of this two-inlet problem is 0.1769. Equations (4.37) and (4.38) are solved for fresh gases within flammability limits obtained mixing the two streams of partially-premixed fuel and vitiated air.

The chemical sources are expressed with the 15-step reduced chemical kinetic ARM2 [113], which has been previously validated under the considered fuel-air mixture conditions [9]. Nineteen species, H_2 , H , O_2 , OH , H_2O , HO_2 , H_2O_2 , CH_3 , CH_4 , CO , CO_2 , CH_2O , C_2H_2 , C_2H_4 , C_2H_6 , NH_3 , NO , HCN , and N_2 are involved in the flame solution, their diffusion coefficient is computed from a mixture-averaged approximation [20]. The Y_c -evolution must be monotonic in physical-space across all the premixed flamelets and for the present conditions, $Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}$ constitutes a fair compromise [24].

4.5.3 Reduced phase space solution for *in situ* premixed flamelets-generated manifolds (IFM)

4.5.3.1 Analysis of differential-diffusion terms

The temperature, CH_4 , CO_2 , CO , H_2O and OH mass fractions, versus Y_c for three equivalence ratios, lean ($\phi = 0.60$), stoichiometric ($\phi = 1$) and rich ($\phi = 1.40$), are displayed in figures 4.6-4.11. The Y_c -space solution is plotted, with and without the differential-diffusion terms – (ii), (iii) and (v) of Eq. (4.37), and, (ii) and (iii) of Eq. (4.38) – against the reference PREMIX physical-space solution.

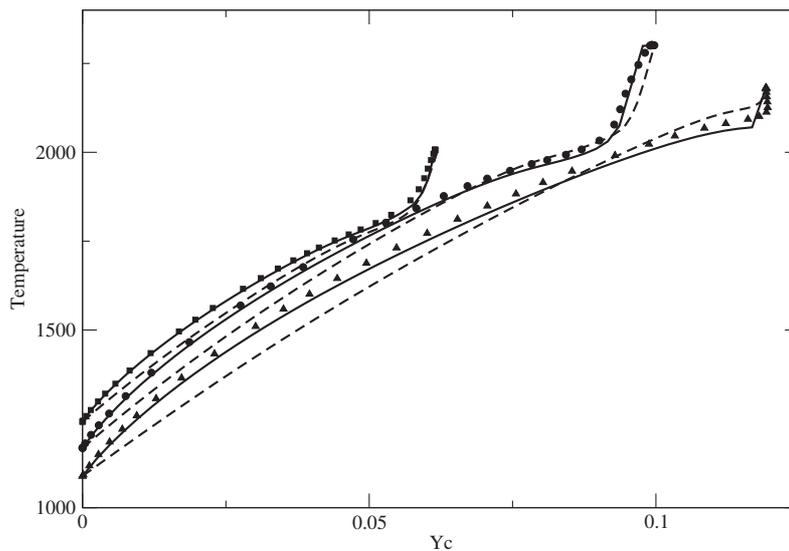


FIGURE 4.6 – Temperature (K) vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049$, $\phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769$, $\phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532$, $\phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution (PREMIX, not all points are shown).

The response of the full set of reduced phase space equation agrees well with the reference solution, which was obtained with different formalism and numerics. Equations (4.37) and (4.38) are thus an interesting model to compute premixed flamelets.

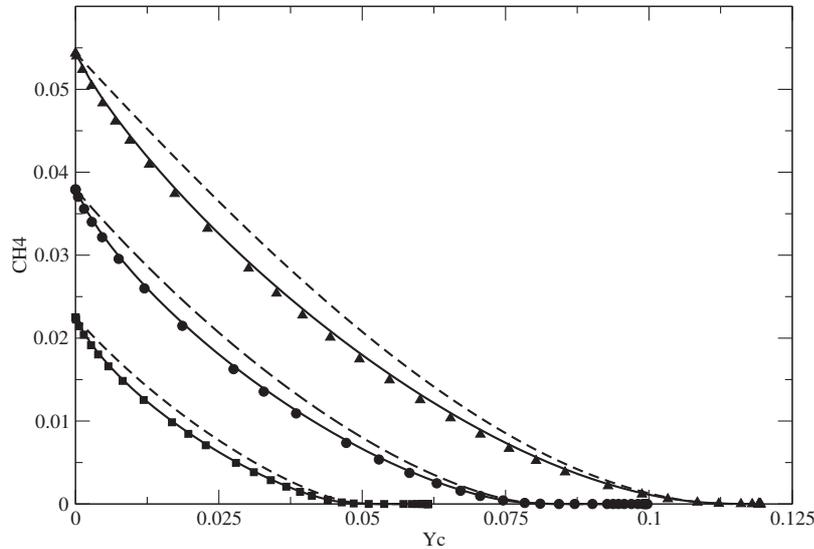


FIGURE 4.7 – CH_4 mass fraction vs Y_c . Square : Lean ($Z = 0.1049$, $\phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769$, $\phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532$, $\phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.

The temperature is well reproduced on the lean side, with and without the differential-diffusion contribution. This is not the case for stoichiometric or rich mixtures (Fig. 4.6) ; if the full solution agrees well with the reference one for all mixtures, a significant deviation is observed without the additional diffusion terms. For the fuel, the departure from the physical-space solution appears also at lean and stoichiometric equivalence ratios (Fig. 4.7), with still a good reproduction of the reference solution with all terms. The same is reported for CO_2 (Fig. 4.8) and CO (Fig. 4.9). However, H_2O (Fig. 4.10) and OH (Fig. 4.11) mostly behave as the temperature does, with a solution that stays acceptable with the reduced form of the reduced phase space equations for the lean flame. Those species are nevertheless not captured for stoichiometric and rich flames with that reduced form. Meaning that the scalar dissipation rate diffusion term, even with a variable Lewis number, $D_i G_c^2 = \chi_{Y_c} / Le_i$, which was included to get this solution (terms (iv) in Eq. (4.37) and (vi) in Eq. (4.38)), is not sufficient to account for differential diffusion effects with accuracy.

For all quantities, the error introduced in the reduced phase space solution because of the absence of differential diffusion terms, is larger for fuel-rich mixtures and decreases with equivalence ratio. This is explained by the larger concentration of fast diffusing radical species containing H-atoms in fuel-rich mixture. At this stage it is not possible to discriminate between the role of the two kind of differential-diffusion terms, correction velocity and diffusion drift between reduced phase space and species. The analysis may be refined by plotting the amplitude of the various terms of Eqs. (4.37) and (4.38), this is done in Figs. 4.12 and 4.13. The terms are plotted including their dY_i/dY_c and dT/dY_c factors. (To

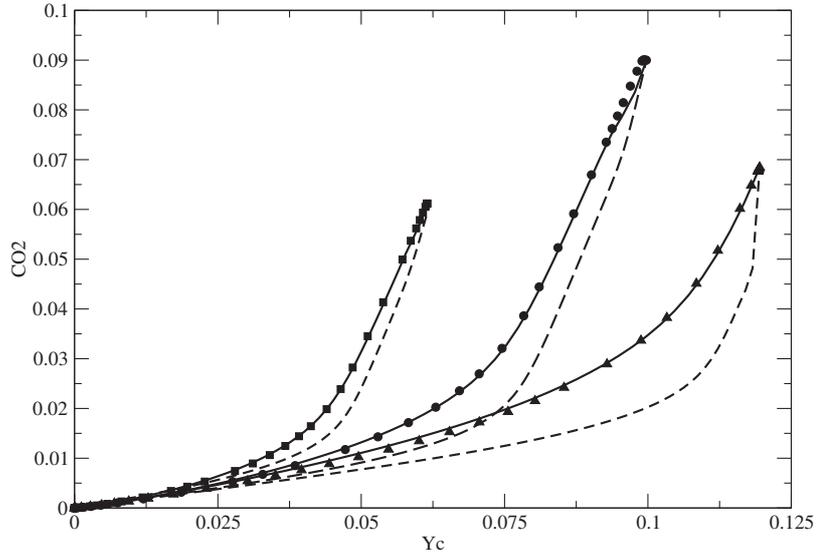


FIGURE 4.8 – CO_2 mass fraction vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049$, $\phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769$, $\phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532$, $\phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.

check convergence, the budget of all terms is shown in Fig. 4.12-d.)

For both equations, it is seen that the chemical sources, and the diffusion contributions ((*iv*) in Eq. (4.37) and (*vi*) in Eq. (4.38)) dominate. The correction velocity contribution stays small, but not the differential-drift (*iii*), which acts mainly in the preheating zone ; this term cannot be neglected.

Integrating through the one-dimensional premixed flamelet, the flame speed may be written :

$$S_L = \frac{1}{\rho^u(Y_{CH_4}^b - Y_{CH_4}^u)} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\omega}_{CH_4}(\xi) d\xi \quad (4.47)$$

$$= \frac{1}{\rho^u(Y_{CH_4}^b - Y_{CH_4}^u)} \int_{Y_c^u}^{Y_c^b} \frac{\dot{\omega}_{CH_4}(Y_c^*)}{G_c(Y_c^*)} dY_c^* \quad (4.48)$$

It is shown in figure 4.14 that S_L obtained from the reduced phase space solution with Eq. (4.48), using 16 points in Y_c -space, reproduces the reference flame-speed solution, computed with Eq. (4.47). Neglecting differential diffusion terms strongly affects S_L (Fig. 4.14).

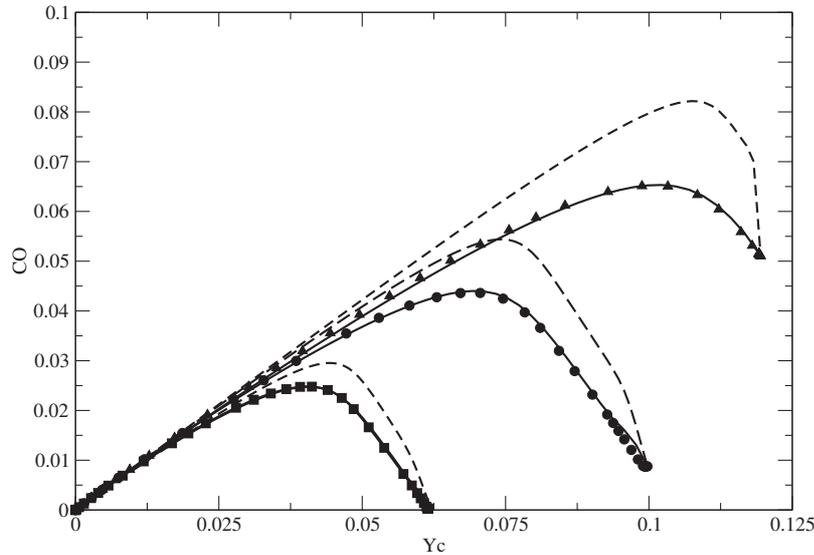


FIGURE 4.9 – CO mass fraction vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049$, $\phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769$, $\phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532$, $\phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.

4.5.3.2 *In situ* flamelet-generated manifolds (IFM)

One of the major shortcoming of reduced phase space tabulated chemistry lies in the need to store the information in a file whose size grows dramatically with the number of control parameters. A look-up table based on a single progress of reaction and including variable equivalence ratio, gradient of equivalence ratio (or scalar dissipation rate or strain rate), pressure, enthalpy and a given degree of dilution by recirculating burnt gases would require six entries. This look-up table becomes a large file, which may not be loaded easily on every processor in the case of massively parallel computing. Once filtered or averaged for Large Eddy Simulation (LES) or Reynolds Average Navier Stokes (RANS) coupling, some tables exhibit self-similar properties [125], but much work can be needed to find these proper self-similar laws with accuracy. Hence, a rapid on-the-fly solution of Eqs. (4.37) and (4.38) would be very convenient, if it can be conducted for hydrocarbon fuels. Also, keeping fixed the definition of the flame control parameters, their very local value could be used in the solving, obviously leading to a much more precise description of the flame response.

To optimize the cpu time devoted to the calculation of local flame solutions, the minimum number of grid points necessary in Y_c -space is first determined. The evolution of the error \mathcal{E}_i versus n_c , the number of flame reduced phase space mesh points, is shown in figure 4.15 :

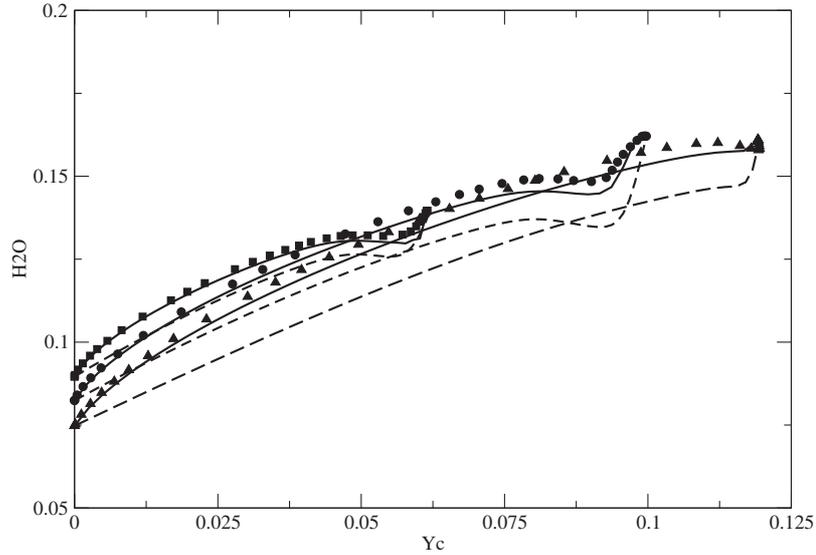


FIGURE 4.10 – H_2O mass fraction vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049$, $\phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769$, $\phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532$, $\phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.

$$\mathcal{E}_i(n_c) = \frac{\sum_{j=1}^{n_c} |Y_i^{ref}(Y_c^j) - Y_i(Y_c^j)|}{\sum_{j=1}^{n_c} Y_i^{ref}(Y_c^j)} \quad (4.49)$$

where Y_i^{ref} denotes a reference solution obtained with $n_c = 80$ and that perfectly matches the PREMIX [60] solution, unfortunately, it is not possible to further reduce the number of points in the physical-space solution, due to lack of convergence. For capturing the major species of the ARM2 [113] chemical scheme and temperature with less than 5% of error, it is seen that around 10 points in reduced phase space are sufficient. Only the H radical is found to need more than 25 points to reach error levels below 5%. The CPU time reduction gained when limiting the number of reduced phase space points, compared to the 80 points reference flame solution, is shown in figure 4.16. The reduction evolves almost linearly with the number of points to reach 95% at $n_c = 10$, there it takes about 1 second to get the flame converged from the initial condition on a 2.4 GHz processor. This CPU time can still be drastically reduced by starting from a previously converged flame, having control parameters close to the desired one.⁴

The relatively low number of points and iterations needed in the frame of this reduced phase space so-

4. This conclusion was reached using the ARM2 skeleton kinetics, fully detailed chemistry may need more points to capture CH radical and other intermediates, however, because of the reduction in CPU time shown in Fig. 4.16, the reduced phase space approach should still be of interest for fully detailed schemes.

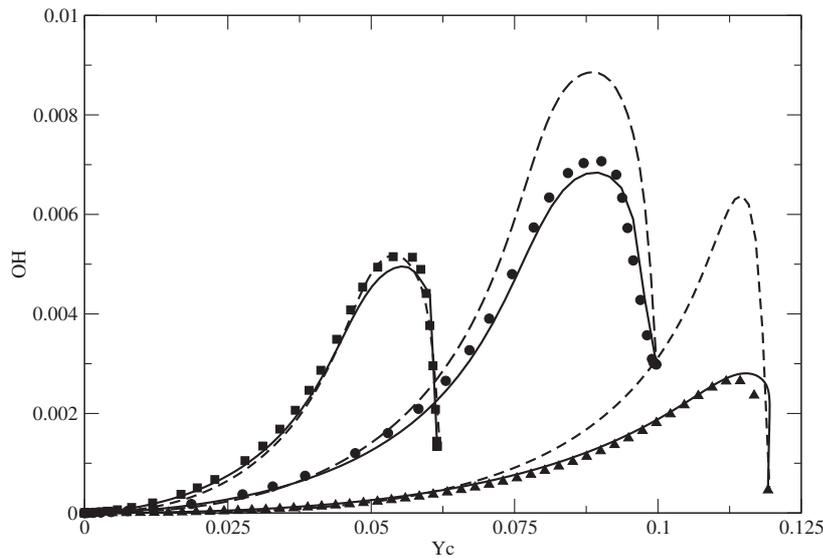


FIGURE 4.11 – OH mass fraction vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049$, $\phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769$, $\phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532$, $\phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.

lution procedure allows for proposing an *in situ* flamelet-generated tabulation. The reduced phase space solution is then computed during the simulation for every flow point concerned by chemical reactions ($Y_c \in]Y_c^u, Y_c^b[$), which represents only a small fraction of the total number of the LES mesh points.

Today two types of combustion DNS are emerging [88], both fully resolving the flow scale but differently addressing chemistry. In the first type, synthetic problems featuring low Reynolds numbers are simulated with detailed chemistry. In the second, Reynolds numbers representative of those found in laboratory flames are considered with billion cells, the smallest flow scales are resolved, but chemistry is then tabulated to avoid solving the thinnest radical layers. The accuracy of such tabulation could be improved using the approach that was discussed in this study.

Depending on the desired level of complexity, various coupling procedures with flow solvers can also be envisioned. For instance in Direct Numerical Simulation (DNS), the $G_c(Y_c)$ function can be computed from Y_c , the computing effort to fully resolve Y_c being much less than the one needed to capture radical species, allowing for soon targeting flow DNS of realistic burners [88]; whereas existing modeled expressions derived from scalar dissipation rate closures [24, 93] may be used in Large Eddy Simulation (LES), *i.e.* when the Y_c signal is not fully resolved. There, additional modeling is required because of unresolved scalar fluctuations; once the flame response relative to local flow properties has been obtained following aforementioned procedure, it takes the form of usual flamelets look-up table and can thus be

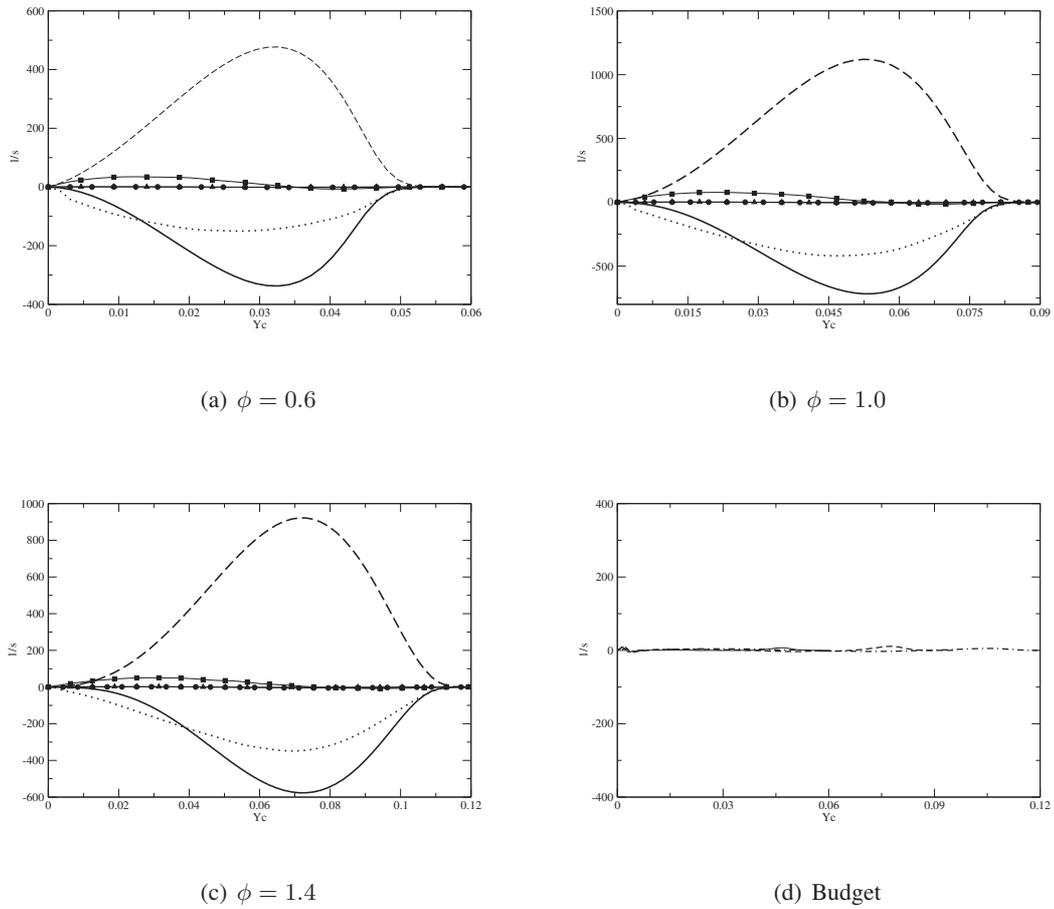


FIGURE 4.12 – Terms of Eq. (4.37) vs Y_c for CH_4 mass fraction. Line : Term (i) $\times dY_{\text{CH}_4}/dY_c$; Circle : (ii) $\times dY_{\text{CH}_4}/dY_c$; Square : (iii) $\times dY_{\text{CH}_4}/dY_c$; Dotted : (iv); Triangle-up : (v); Dashed : (vi). Budget: Line $\phi = 0.6$; Dashed $\phi = 1.0$; Dotted-dashed $\phi = 1.4$.

filtered with presumed probability density functions or any other methods.

With this *in situ* flamelet-generated manifolds, parameters as flame boundary conditions can easily evolve according to the local flow composition (for instance based on the atomic concentration) and/or enthalpy (for accounting for heat loss) and pressure, in the case of rapid compression. Considering that differential diffusion mainly acts on hydrogen within reaction zones, and assuming that the local carbon/oxygen ratio is known, the corresponding fresh gas mixture is obtained for the same equivalence ratio. Then, the laminar flames are computed for a fixed enthalpy. A method to select this enthalpy and the fresh conditions, when dilution by non-adiabatic burnt gases occurs, is detailed in [125] for fixed flamelet-tabulation, and the same procedure can be used in the context of the *in situ* laminar-flame condition discussed in this study.

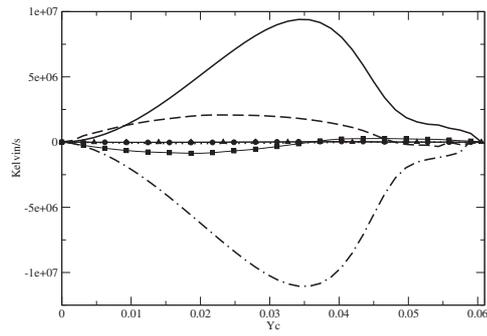
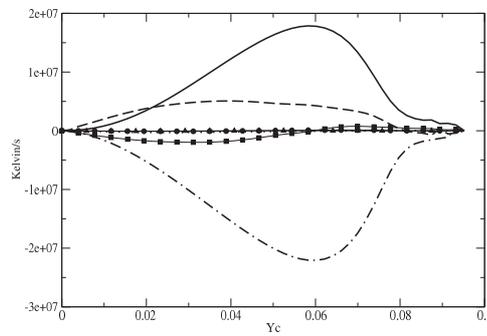
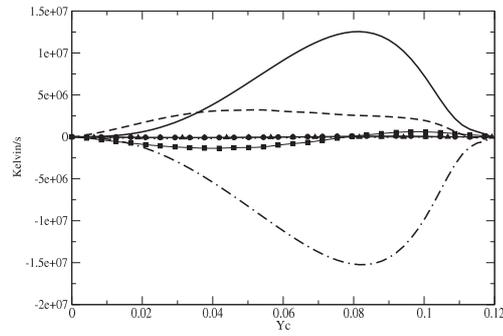
(a) $\phi = 0.6$ (b) $\phi = 1.0$ (c) $\phi = 1.4$

FIGURE 4.13 – Terms of temperature Eq. (4.38) vs Y_c . Line : Term $(i) \times dT/dY_c$; Circle : $(ii) \times dT/dY_c$; Square : $(iii) \times dT/dY_c$; Dotted : $(iv) \times dT/dY_c$; Triangle-up : $(v) \times dT/dY_c$; Dashed : (vi) . Dashed-dotted : (vii) .

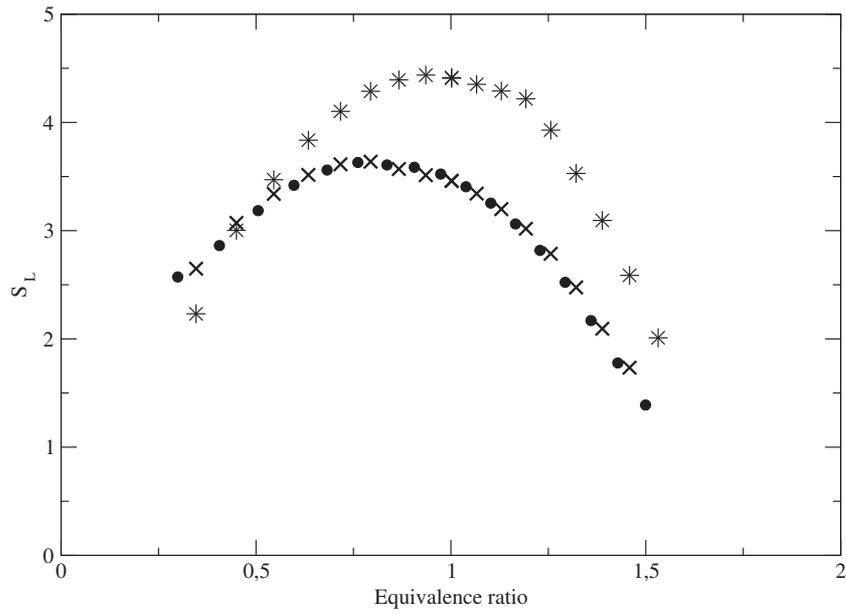


FIGURE 4.14 – S_L (m/s) versus equivalence ratio. ● : physical-space reference solution. × : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). * : Solution neglecting differential diffusion terms.

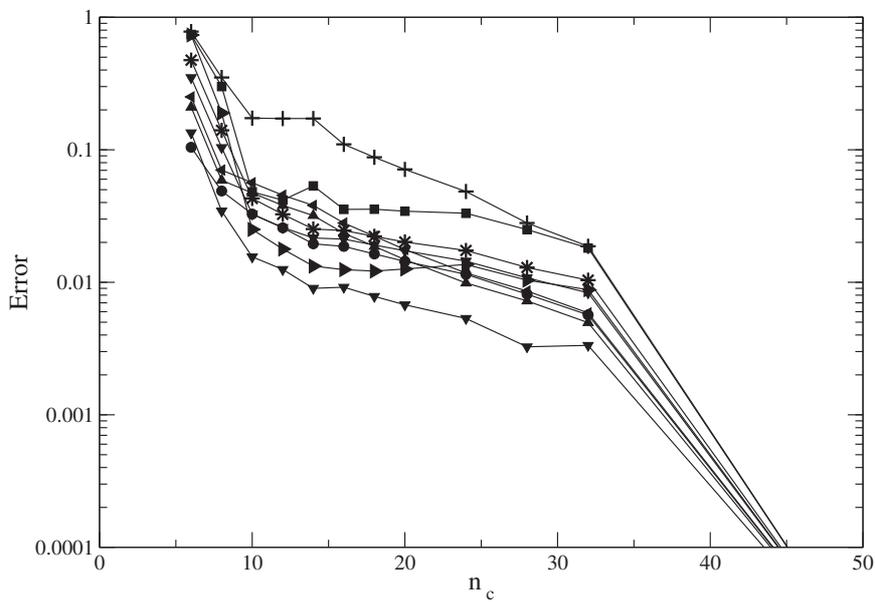


FIGURE 4.15 – $\mathcal{E}_i(n_c)$ (Eq. (4.49)) vs number of mesh points. ▼ : CH_4 ; ● : H_2O ; ■ : OH ; ▲ : CO ; ◄ : CO_2 ; + : H ; * : HO_2 ; ► : C_2H_2 ▲ : Temperature.

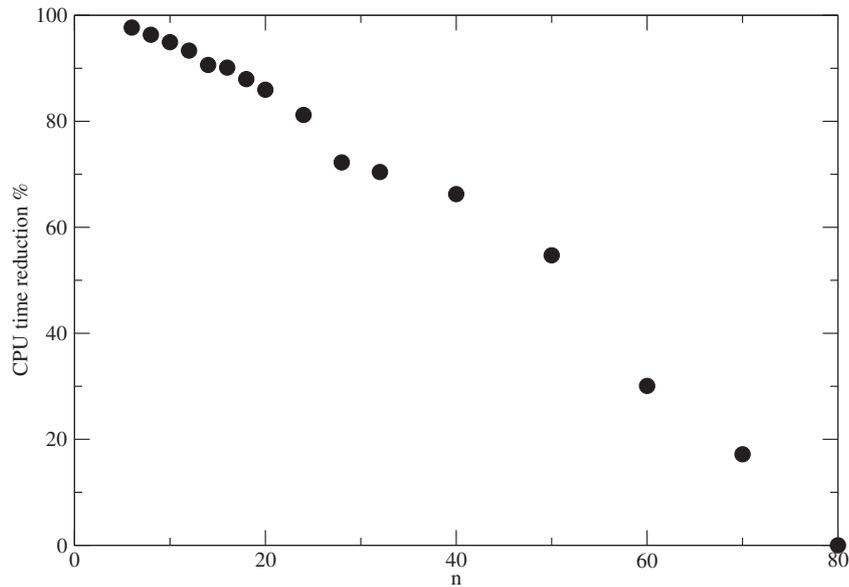


FIGURE 4.16 – Reduction (%) in CPU time relatively to the 80 points reference reduced phase space solution.

4.6 Conclusions

Avec les simplifications dans la représentation de la physique de la combustion turbulente que permet l'hypothèse des flammelettes ou des réacteurs homogènes, on est donc en mesure de découpler le calcul de la thermochimie de l'intégration des équations de la mécanique des fluides. Cette dernière permet de déterminer les paramètres d'entrée dans les tables thermochimiques et ainsi d'en extraire les informations au cours du calcul de la combustion turbulente. Cette approche implique une diminution drastique de l'effort numérique nécessaire à la description des flammes complexes en proposant une solution à chaque problème soulevé par la prise en compte de la chimie complexe dans la description numérique de la combustion turbulente :

1. les calculs des propriétés thermochimiques sont effectués dans une phase préliminaire au calcul de la combustion turbulente. Les efforts numériques sont donc découplés et seules des interpolations sont à la charge du solveur des équations de la mécanique des fluides réactifs, pour le calcul de ces propriétés ;
2. le nombre d'espèces chimiques à transporter pour décrire la thermochimie du système physique est réduit de manière drastique ;
3. la variable d'avancement a une évolution temporelle beaucoup plus lente que les espèces intermédiaires. Le problème de pas de temps d'intégration numérique beaucoup trop faibles à cause de la chimie est donc résolu.

Cependant, la limite de la mémoire des processeurs impose des restrictions sur la quantités d'informations contenues dans les tables, et donc sur la richesse de la description qu'elles peuvent permettre. Pour contourner ce problème, une procédure permettant de calculer rapidement les solutions des flammelettes de prémélange stationnaires et étirées dans l'espace des phases réduit est proposée et testée dans le cadre de cette thèse. Dans cet espace, les solutions sont naturellement moins raides que dans l'espace physique, et la description numérique de ces solutions nécessite beaucoup moins de points. Moyennant encore des efforts, d'une part, pour réduire les temps de calculs, et, d'autre part, pour que le vecteur d'initialisation permette systématiquement la convergence de la méthode de Newton, cette technique apparaît comme une solution potentielle à la résolution *in situ* de la chimie complexe avec prise en compte des effets de diffusion différentielle dans une configuration 3D où une flamme turbulente et instationnaire se développe. Cette approche apparaît comme plus flexible que la stratégie de tabulation, rendant possible, par exemple, la prise en compte des variations spatio-temporelles de pression, de composition ou d'enthalpie des gaz frais.

Chapitre 5

Description et analyse de l'écoulement dans une Machine à Compression Rapide (MCR)

Sommaire

5.1	Introduction	107
5.2	Calibration des conditions aux limites d'entrée par LES	109
5.2.1	Modélisation du problème	110
5.2.2	Conditions aux limites NSCBC de type compression isentropique	112
5.2.3	Détermination du profil de vitesse d'admission	113
5.2.4	Validation du modèle : LES de l'écoulement inerte	115
5.3	Paramètres de la DNS de l'écoulement réactif	120
5.3.1	Modélisation de la chimie	121
5.3.2	Equations de transport utilisées pour le post-traitement des DNS	122
5.3.3	Différents cas étudiés	122
5.4	Analyse des scénarios d'auto-allumage	123
5.4.1	Description phénoménologique	123
5.4.2	Auto-allumage en régime homogène ou fragmenté	128
5.4.3	Analyse de l'auto-inflammation en 2D	131
5.4.4	Tests et exploitation <i>a posteriori</i> de la tabulation des réponses de PSR	139
5.4.5	Diagramme des régimes d'auto-inflammation en mode CAI/HCCI	157
5.5	Conclusions	159

5.1 Introduction

En conclusion du chapitre 2, on avait souligné l'absence, dans la littérature, de travaux étudiant l'impact des inhomogénéités statistiques des propriétés de la turbulence dans des conditions réalistes, par la simulation numérique directe. La prescription de spectres turbulents homogènes et isotropes en conditions initiales permet une analyse de la sensibilité de l'auto-allumage aux quantités caractéristiques de ce spectre, comme l'intensité turbulente ou encore l'échelle intégrale [22, 81, 109, 6, 110, 28, 12, 50].

Ces études ont permis d'extraire des informations capitales sur le comportement de l'auto-inflammation, mais négligent l'impact d'un écoulement réaliste, tel que celui généré par la mise en mouvement du piston dans le cylindre d'un moteur à combustion interne, ou encore, dans la chambre de combustion d'une MCR.

D'autres angles d'attaque complémentaires ont été adoptés afin d'étudier numériquement les interactions entre l'écoulement généré dans une MCR et la chimie de l'auto-inflammation. A l'image de l'approche multi-zones présentée dans la sous-section 2.3.3.1, la description fine de la cinétique chimique y est, en général, privilégiée à celle de l'écoulement, dont on ne représente que les caractéristiques jugées essentielles.

Ainsi, dans [131], Würmel et Simmie proposent une stratégie numérique permettant d'étudier l'écoulement généré dans une MCR à pistons opposés. L'objectif principal est d'analyser l'impact de la géométrie des crevices des têtes des pistons sur l'évolution du champ de température pendant la compression. Les auteurs déterminent ainsi la géométrie optimale pour laquelle aucun tourbillon de coin n'est formé et, en conséquence, pour laquelle le mélange turbulent entre le fluide froid provenant des parois et le fluide chaud au coeur de la chambre de combustion, est minimisé. Un schéma cinétique complexe décrivant la combustion du *n*-heptane est utilisé en parallèle à un solveur de type RANS 2D. Des conditions aux limites périodiques reproduisent artificiellement la topologie cylindrique de la chambre de combustion. Plus récemment, Ihme [54] étudie les différentes sources de turbulence possibles dans une MCR. La chimie est prise en compte, soit par calculs de chimie complexe, soit par tabulation. L'écoulement est supposé bidimensionnel. L'accroissement de l'énergie cinétique turbulente durant la phase de compression est modélisé en utilisant la théorie de « distortion rapide » (*Rapid distortion theory*). Elle suppose que le forçage de la turbulence n'est assuré que par l'écoulement réactif moyen et que les termes convectifs non-linéaires des équations de conservation associées aux quantités fluctuantes sont négligeables. L'auto-allumage est décrit par un modèle de micro-mélange impliquant des particules, dégénérant en un réacteur homogène en l'absence de perturbation des champs initiaux de vitesse, de composition et de température. La mise en oeuvre numérique de ces modèles nécessite peu de ressources de calcul. Ils se prêtent donc particulièrement bien à l'étude de sensibilité en prenant en compte la dynamique du mélange aux échelles non-résolues.

Il est maintenant bien reconnu que les détails cinétiques sont fondamentaux dans la description fine des mécanismes de l'auto-inflammation en mode CAI/HCCI, mais il convient de s'interroger sur la pertinence de l'utilisation d'un schéma cinétique complexe si les interactions turbulence/dégagement de chaleur ne sont pas parfaitement prises en compte dans la description. Dans ce chapitre, les interactions turbulence/combustion dans la chambre de combustion de la machine à compression rapide de l'UPMC, développée et étudiée expérimentalement par Guibert *et al.* [47, 48] (*c.f.* § 2.3.2.2), sont abordées par la simulation numérique directe. Cette configuration expérimentale est conçue plus spécifiquement pour l'étude de l'impact de la turbulence résiduelle résultant de la compression sur l'initiation et le développement de l'auto-inflammation en mode CAI/HCCI. En effet, même dans le cas idéal où la charge comprimée est parfaitement homogène en composition, des fluctuations spatiales de température sont générées par le transport turbulent du fluide refroidi par les parois. Elles sont dépendantes des propriétés locales de l'écoulement et se superposent à l'augmentation globale de température induite par la compression volumétrique. Ainsi, dans cette MCR, en plus de la mise en mouvement du mélange par la

piston, la turbulence est générée par une grille placée sur le plan d'admission. Dans l'expérience, la diamètre des trous de la grille permet de paramétrer cette étude. Numériquement, il serait très coûteux d'aborder l'analyse fine des plus petits détails de l'écoulement généré par ces trois grilles ; c'est pourquoi on n'étudie, dans la suite, que la configuration utilisant la grille de 69 mailles circulaires de 3 mm de diamètre. Compte-tenu des moyens de calcul disponibles actuellement, une simulation numérique directe intégrant un schéma cinétique complexe n'est pas non plus envisageable dans ce type de configuration ; l'utilisation de cette approche, la plus réaliste, mais aussi la plus coûteuse, est limitée pour le moment à la description de cas 2D ou/et de géométries canoniques, dans lesquelles la dynamique de l'écoulement est synthétique. D'un autre côté, une approche plus macroscopique, comme celles présentées dans le paragraphe précédent, ou même comme la LES ne permettrait pas de pousser l'analyse à des échelles suffisamment fines pour identifier les détails du processus d'auto-allumage. Dans cette étude, une stratégie intermédiaire en deux étapes est adoptée :

- l'écoulement inerte dans la chambre de combustion la MCR de l'UPMC est simulé numériquement par une LES, afin de calibrer une procédure d'admission 3D représentative de celle observée expérimentalement dans cette configuration [48]. En d'autres termes, il s'agit ici de déterminer des conditions aux limites réalistes au niveau du plan d'entrée, muni d'une grille, de la chambre de combustion cylindrique. Pour être représentatives des conditions expérimentales, elles devront bien entendu être fonctions du temps. Cette procédure de calibration pourra être validée d'un point de vue global par comparaison avec des données expérimentales fournies par le Professeur Guibert et son équipe. L'écoulement généré par la prescription de ces conditions aux limites, et la topologie du champ de température résultant, ne seront donc pas arbitraires ou synthétiques ;
- en conservant cette séquence d'admission, on réduit les dimensions de la chambre de combustion d'un facteur 4 par direction (*i.e.* le volume total est réduit 64 fois), de manière à ce que sa description numérique directe soit abordable. La résolution spatiale qui sera alors atteinte est d'environ 20 μm . De plus, pour les mêmes raisons de contrainte de résolution et de coût numérique, une chimie globale sera mise en oeuvre dans ce calcul. Seules les interactions entre un dégagement de chaleur modèle et la turbulence seront ainsi abordées ; les phénomènes impliquant de multiples échelles spatio-temporelles chimiques ne sont donc pas considérés dans cette étude¹.

Les hypothèses de modélisation utilisées dans cette étude seront présentées dans la section suivante. Puis, la procédure de calibration des conditions limites d'admission sera présentée et validée par une série de simulations aux grandes échelles. En outre, les analyses de DNS 3D étayées par des calculs 2D complémentaires seront effectuées. Ces résultats ont donné lieu à une publication [73] (Lodier *et al.*, Combustion and Flame, 2012) et ont été réorganisés, ici, de manière à s'intégrer dans le contexte plus large de ce chapitre. Enfin, une approche originale de post-traitement des données des DNS, utilisant *a posteriori* des tables thermo-chimiques de réacteurs homogènes, est également proposée. Elle permet d'aborder le phénomène d'auto-inflammation d'un point de vue complémentaire.

5.2 Calibration des conditions aux limites d'entrée par LES

Les simulations aux grandes échelles présentées dans cette section sont effectuées sur un maillage composé d'environ 4 millions de point, pour une résolution spatiale de 0.24 mm. Le transport de quantité

1. Aux pressions considérées, tout mécanisme chimique impliquant des espèces intermédiaires nécessiterait un maillage de résolution bien inférieure à 20 μm

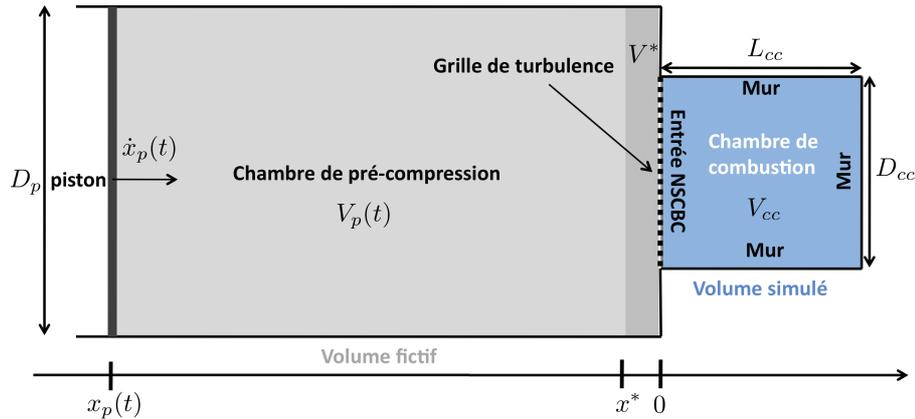


FIGURE 5.1 – Schéma modèle de la MCR simulée [48]. La nature des conditions aux limites utilisées est indiquée. L_{cc} , D_{cc} , V_{cc} : longueur, diamètre et volume de la chambre de combustion. V^* : volume mort. D_p : diamètre du piston. $x_p(t)$: position du piston. $V_p(t)$: volume restant à balayer par le piston. $x^* = x_p(t = t_{TDC})$: position du piston au PMH.

de mouvement ou de masse par les fluctuations non-résolues est modélisé par la fermeture Wall Adapting Local Eddy-viscosity (WALE) [94], développée pour reproduire les bonnes lois de scaling au niveau des parois. La résolution spatiale des champs PIV, auxquels les résultats des calculs LES sont comparés afin de valider la procédure de calibration, est de 0.5 mm.

5.2.1 Modélisation du problème

Pour simplifier la mise en données du calcul, les organes principaux de la configuration expérimentale, présentée sur la figure 2.8 dans le chapitre 2, sont schématisés sur la figure 5.1. Dans l'expérience, le rapport volumétrique de la MCR est fixé à 15.6 :1. La chambre de pré-compression a une longueur de 200 mm ; son diamètre, correspondant à celui du piston D_p , est de 91.5 mm. Le diamètre D_{cc} de la chambre de combustion cylindrique est de 40 mm, et sa longueur D_{cc} est de 44 mm. Le volume mort V^* représente le volume du convergent assurant la jonction entre la chambre de pré-compression et la chambre de combustion. La course du piston est stoppée à l'entrée du convergent, c'est-à-dire en $x = x^*$ dans la représentation modèle proposé ici. Une interpolation de l'évolution de la vitesse du piston au cours du temps est présentée sur la figure 5.2. Le point mort haut (PMH) est atteint à $t_{TDC} = 0.029$ ms.

La pression et la température sont initialement de 27000 Pa et 343 K. Le gaz inerte comprimé est composé, en pourcentages molaires, de 64% de CO_2 et de 36% de N_2 , sa masse molaire étant ainsi de 38.32 g.mol^{-1} .

Dans les études numériques présentées dans la suite de ce chapitre, des hypothèses simplificatrices ont été faites. Tout d'abord, la résolution spatiale nécessaire à une étude de type DNS rend impossible la simulation de tout le volume fluide comprimé par le piston. Seule la description numérique de la chambre de combustion est abordée (domaine en bleu sur la figure 5.1). On suppose donc que l'écoulement généré par le piston dans la chambre de pré-compression, dont le volume est $V_p(t) + V^*$, est décorrélé de celui qui se développe dans la chambre de combustion. La présence de la grille de turbulence caractérisée par

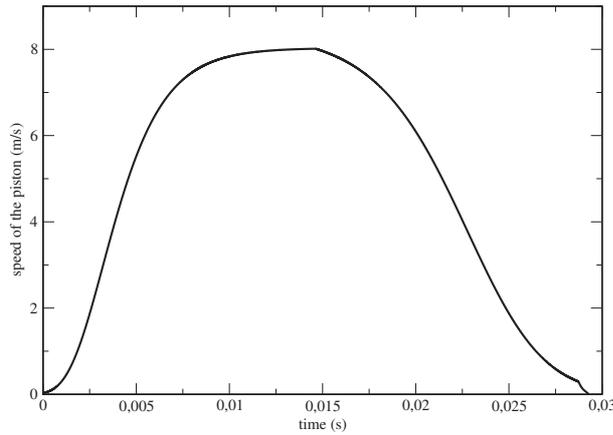


FIGURE 5.2 – Interpolation à partir des données expérimentales de l'évolution de la vitesse du piston au cours du temps.

des mailles de 3 mm corrobore cette hypothèse, même s'il est impossible d'éprouver rigoureusement sa validité.

La nature des conditions aux limites utilisées dans les simulations numériques est également présentée sur la figure 5.1 :

- les parois sont prises en compte par des conditions aux limites de type mur non-glissant ;
- sur le plan d'admission muni de la grille, les conditions limites sont de type entrée NSCBC-3D [72]. La méthode a été adaptée au cas d'une compression isentropique (*c.f.* sous-section 5.2.2). L'effet du mouvement du piston dans la chambre de pré-compression sur l'écoulement dans la chambre de combustion devra donc être modélisé en prescrivant un profil de vitesse d'entrée adéquate.

Des hypothèses et modèles sont également adoptés pour décrire le transport moléculaire et les propriétés thermiques de l'écoulement :

- les capacités thermiques c_p et c_v sont constantes. γ , le rapport des deux, est calculé pour les conditions thermodynamiques initiales et vaut 1.24 ;
- les nombres de Lewis sont unitaires ;
- le coefficient de viscosité dynamique est calculé par une loi de Sutherland ;
- le flux thermique normal aux parois est proportionnel à la différence entre la température moyennée sur le domaine $\langle T \rangle$ et la température ambiante T_{out} , à l'extérieur de la MCR. Par continuité du flux thermique, on obtient que

$$\dot{Q} = -h(T_{out} - \langle T \rangle)S_{cc} = \frac{\mu c_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial n} S_{cc}. \quad (5.1)$$

S_{cc} correspond à la surface délimitant le volume de la chambre de combustion. h est le coefficient de convection ; il est difficile d'estimer ce coefficient expérimentalement et ne disposant pas de valeur numérique, on l'a fixé, plus ou moins arbitrairement, à $40 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, c'est-à-dire à deux fois sa valeur dans le cas de la convection naturelle. Bien que cette axe d'étude n'ait pas été abordé

durant cette thèse, il pourrait être intéressant de tester la sensibilité des mécanismes observés dans la suite de ce chapitre à ce paramètre. Les flux de chaleur sont pris en compte numériquement par l'intermédiaire d'une condition limite de type Neumann. Ainsi, au niveau des mailles du domaine fluide adjacentes aux parois, à partir de l'égalité 5.2, on peut écrire que

$$\frac{\partial T}{\partial n} = -\frac{hPr}{\mu c_p} (T_{out} - \langle T \rangle). \quad (5.2)$$

Une fois que le PMH est atteint, les conditions limites d'admission basculent en condition de type mur ; la chambre de combustion est alors complètement fermée. Avant le point mort haut, elles doivent mimer l'effet de la compression volumétrique, supposée isentropique. La stratégie de modélisation des conditions aux limites d'admission est décrite dans ce qui suit.

5.2.2 Conditions aux limites NSCBC de type compression isentropique

Dans [132] et dans le cadre de l'approche NSCBC, les auteurs décrivent une méthode permettant d'amortir, en entrée, les ondes caractéristiques associées aux scalaires, tels que la température ou les concentration des espèces. Ce formalisme a été adapté par Guido Lodato (private communication) pour obtenir l'expression de l'onde entropique \mathcal{L}_2 dans des conditions isentropiques. Plutôt que de relaxer la température vers sa valeur cible, le problème revient ici à relaxer l'entropie vers sa valeur initiale

$$s_0 = c_v \log \left(\frac{P_0}{\rho_0^\gamma} \right) + s_{\text{ref}}. \quad (5.3)$$

Pour obtenir ce type de condition limite, la procédure est similaire à celle proposée dans [132]. En partant de l'équation de l'énergie à coefficient constant

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{P}{\rho^\gamma} \right) + \bar{u} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{P}{\rho^\gamma} \right) = 0, \quad (5.4)$$

on obtient la condition limite pour la pression et l'entropie perturbées,

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\tilde{P}}{\rho^\gamma} \right) + \beta_2 \tilde{s} = 0. \quad (5.5)$$

La perturbation d'entropie \tilde{s} est écrite comme

$$\tilde{s} = \exp(-z[t - g(x)]). \quad (5.6)$$

Par conservation de l'entropie, l'équation 5.3 peut s'écrire sous la forme

$$\frac{\tilde{P}}{\rho^\gamma} = \exp \left(\frac{\tilde{s} - s_{\text{ref}}}{c_v} \right). \quad (5.7)$$

En dérivant la relation 5.7, il vient que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\tilde{P}}{\rho^\gamma} \right) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\tilde{s} - s_{\text{ref}}}{c_v} \right) \exp \left(\frac{\tilde{s} - s_{\text{ref}}}{c_v} \right) \\ &= \frac{\tilde{P}}{\rho^\gamma} \frac{1}{c_v} \frac{\partial \tilde{s}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Puis, en injectant 5.6 dans 5.8, on obtient

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\tilde{P}}{\rho^\gamma} \right) &= -\frac{\tilde{P}}{\rho^\gamma} \frac{(\gamma-1)\overline{W}}{\mathcal{R}} z \tilde{s} \\ &= -\frac{(\gamma-1)T}{\rho^{(\gamma-1)}} z \tilde{s}.\end{aligned}\quad (5.9)$$

De la même manière que dans [132], z est supposé proportionnel à l'inverse du temps acoustique a/ℓ_x , où ℓ_x est la longueur du domaine de calcul dans la direction perpendiculaire au plan d'entrée (dans le cas de la MCR, $\ell_x = L_{cc}$). La condition limite pour l'entropie perturbée 5.5 devient

$$\left[\beta_2 - \frac{(\gamma-1)T}{\rho^{(\gamma-1)}} z \right] \tilde{s} = 0, \quad (5.10)$$

$$\Rightarrow \beta_2 = \frac{(\gamma-1)T}{\rho^{(\gamma-1)}} z = -\eta_2 \frac{(\gamma-1)T}{\rho^{(\gamma-1)}} \frac{a}{\ell_x}, \quad (\eta_2 \leq 0). \quad (5.11)$$

\mathcal{L}_2 peut être obtenue à partir de sa définition et de l'équation 5.11 comme

$$\mathcal{L}_2 = \rho^\gamma \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{P}{\rho^\gamma} \right) = \rho^\gamma \eta_2 \frac{(\gamma-1)T}{\rho^{(\gamma-1)}} \frac{a}{\ell_x} (s - s_0) = \eta_2 \frac{(\gamma-1)P a \overline{W}}{\mathcal{R} \ell_x} (s - s_0). \quad (5.12)$$

En utilisant la définition 5.3 et la conservation de l'entropie, on obtient l'identité

$$s - s_0 = c_v \log \left[\left(\frac{P}{P_0} \right)^{1-\gamma} \left(\frac{T}{T_0} \right)^\gamma \right], \quad (5.13)$$

qui, une fois injectée dans l'équation 5.12, donne l'expression finale de l'amplitude \mathcal{L}_2 de l'onde entropique

$$\mathcal{L}_2 = \eta_2 \frac{P a}{\ell_x} \log \left[\left(\frac{P}{P_0} \right)^{1-\gamma} \left(\frac{T}{T_0} \right)^\gamma \right]. \quad (5.14)$$

5.2.3 Détermination du profil de vitesse d'admission

Sur le plan d'admission, le profil de vitesse est imposé suivant la méthode NSCBC-3D durant les 29 ms de la phase de compression. Des hypothèses sont nécessaires pour parvenir à modéliser l'évolution dans la composante normale au plan d'entrée de la vitesse, qui sera donc, dans les termes employés dans le contexte NSCBC, la vitesse cible, identifiée par l'exposant *, vers laquelle la condition limite effective sera relaxée.

Tout d'abord, on décompose ce champ en une partie moyenne $\langle U \rangle$ et une partie fluctuante u , en coordonnées cylindriques,

$$U^*(r, \theta, t) = \langle U \rangle (r, \theta, t) + u(r, \theta, t). \quad (5.15)$$

$u(r, \theta, t)$ est obtenue par la génération d'un bruit turbulent corrélé vérifiant des propriétés statistiques paramétrées par l'utilisateur [63]. Ici, les paramètres ont été ajustés de façon à reproduire l'effet de la grille de 69 trous de 3 mm de diamètre. L'échelle intégrale est estimée comme $l_t = D_{cc}/10 = 4$ mm, et l'écart-type de fluctuations de vitesse est fixée à $u' = U_o(t)/10$. Le nombre de Reynolds turbulent est alors de l'ordre 1200 et l'échelle de Kolmogorov peut être estimée à 20 μm . De plus, on suppose que la partie moyenne $\langle U \rangle$ est axisymétrique et auto-similaire en temps. Elle peut alors être écrite comme

le produit d'une fonction de forme normalisée F^+ uniquement dépendante du rayon r et d'une fonction d'amplitude U_o , que l'on identifie ici à la vitesse débitante, dépendante uniquement du temps,

$$\langle U \rangle (r, \theta, t) = U_o(t)F^+(r). \quad (5.16)$$

Si $U_o(t)$ est la vitesse débitante, F^+ doit donc être normalisée de façon à ce que son intégrale sur le plan d'entrée soit unitaire :

$$F^+(r) = \frac{F(r)}{F_o} = \frac{F(r)}{2\pi \int_0^{D_{cc}/2} F(r)rdr}. \quad (5.17)$$

A cette étape, modéliser $\langle U \rangle$ revient donc à déterminer $U_o(t)$ et $F^+(r)$.

$U_o(t)$, la vitesse débitante, est responsable des modifications des propriétés thermodynamiques globales dans la chambre de combustion ; en effet, imposer un débit dans un volume fermé revient à augmenter la pression et la température moyenne de ce volume. C'est donc par l'intermédiaire de cette quantité que la compression volumétrique du mélange par le piston est introduite dans la description et donc, on doit avoir $U_o(t) = f(\dot{x}_p(t))$ avec $\dot{x}_p(t)$ la vitesse du piston au cours du temps, mesurée par les expérimentateurs. Si l'on suppose que la compression est isentropique et que le volume comprimé est un réacteur homogène, on montre facilement à partir de l'équation de continuité 3.22 que la variation relative de la masse volumique notée $K(t)$ peut s'écrire

$$K(t) = \frac{1}{\rho(t)} \frac{d\rho(t)}{dt}. \quad (5.18)$$

Sous cette hypothèse d'homogénéité, pour tout volume de contrôle dans le système, la conservation de la masse se traduit par

$$K(t)V(t) = - \int_{\partial V} \mathbf{U} \cdot \mathbf{n} dS, \quad (5.19)$$

où ∂V est la surface délimitant le volume $V(t)$. Si l'on applique la relation 5.19 au volume $V_p(t) + V^*$ et au V_{cc} , on obtient que

$$K(t) = - \frac{1}{V_p(t) + V^*} (-\dot{x}_p(t)S_p + U_o(t)S_{cc}) = \frac{1}{V_{cc}} U_o(t)S_{cc}, \quad (5.20)$$

où $S_p = \pi D_p^2/4$ et $S_{cc} = \pi D_{cc}^2/4$ sont respectivement les sections du piston et de la chambre de combustion. En notant $x_p(t)$ la position du piston à l'instant t (i.e. $x_p(t) = \int_{t=0}^t \dot{x}_p(t') dt'$), le premier volume de contrôle peut s'écrire $V_p(t) + V^* = S_p(x^* - x_p(t)) + V^*$, où $V^* = |x^*|S_p$ correspond au volume mort. Il vient finalement que

$$U_o(t) = \frac{R_v}{1 + R_v} \left(\frac{D_p}{D_{cc}} \right)^2 \dot{x}_p(t), \quad (5.21)$$

avec $R_v = V_{cc}/[(\pi D_p^2/4)(x^* - x_p(t))/4 + V^*]$.

$F(r)$, la fonction de forme, est beaucoup plus difficile à déterminer. Elle est en grande partie responsable de la topologie de l'aérodynamique générée dans la chambre de combustion. On lui imposera un une loi de type

$$F(r) = \max [0.5(\tanh(f_1(f_2 - r/D_{cc})) + 1) - f_3, 0], \quad (5.22)$$

et on fera varier les valeurs numériques des paramètres f_1 , f_2 et f_3 afin d'obtenir numériquement les champs de vitesse les plus représentatifs possibles de ceux observés expérimentalement, dans les mesures PIV du fluide inerte. Les différents profils d'admission testés et leurs paramètres sont regroupés sur la figure 5.3.

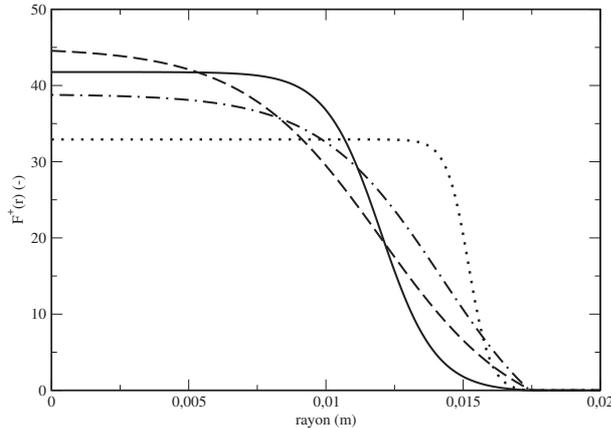


FIGURE 5.3 – Les différents profils F^+ testés. Ligne continue : profil 1 ($f_1 = 20.0$, $f_2 = 0.300$ et $f_3 = 0.0045$); points : profil 2 ($f_1 = 50.0$, $f_2 = 0.380$ et $f_3 = 0.0045$); tirets : profil 3 ($f_1 = 8.0$, $f_2 = 0.300$ et $f_3 = 0.1000$); points+tirets : profil 4 ($f_1 = 9.0$, $f_2 = 0.355$ et $f_3 = 0.1900$).

Dans ce qui suit, on confronte les résultats obtenus expérimentalement par PIV, à ceux obtenus numériquement par la LES 3D pour chacun des quatre profils $F(r)$ testés.

5.2.4 Validation du modèle : LES de l'écoulement inerte

5.2.4.1 Du point de vue de la thermodynamique globale

Comme signalé plus haut, la qualité de la description numérique des conditions thermodynamiques globales au cours du temps dans la chambre de combustion est conditionnée par celle de la modélisation de la vitesse débitante sur la section d'admission, $U_o(t)$, et donc, par la validité des hypothèses utilisées pour obtenir ce modèle. La fonction de forme F^+ n'a pas d'impact sur la thermodynamique globale.

Avant tout, il convient de noter que malgré une relaxation rapide vers la valeur cible U^* , une dérive de la condition limite effective, inhérente à l'approche NSCBC, est observée; les valeurs au cours du temps, de la vitesse débitante sur le plan d'entrée sont en effet sous-estimées, ce qui résulte en une sous-estimation du rapport de compression. Pour contourner ce biais, un coefficient de correction de 1.4 est affecté à U^* dans le calcul ($U_{cor}^* = 1.4U^*$).

L'évolution au cours du temps de la pression dans la chambre de combustion est mesurée par les expérimentateurs et peut être comparée à la pression moyennée sur le volume de la chambre de combustion obtenue numériquement (*c.f.* figure 5.4). L'accord entre les deux comportements est très satisfaisant.

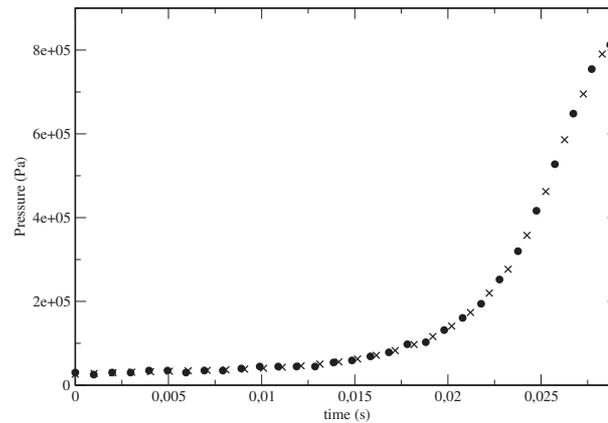


FIGURE 5.4 – Evolution, au cours du temps, jusqu'à l'instant du point mort haut, de la pression moyenne dans la chambre de combustion. ● : expérience ; × : LES

Pour un état thermodynamique initial $P_0 = 27000$ Pa et $T_0 = 343$ K, on compare les conditions au PMH obtenues numériquement à celles obtenues expérimentalement, dans le tableau 5.1. Ici encore, l'accord obtenu est quasiment parfait. Les quantités thermodynamiques globales sont bien reproduites au cours du temps et la modélisation de $U_o(t)$ est donc validée.

	Expérience	LES
P_{TDC} (kPa)	815	810
T_{TDC} (K)	665	663

TABLE 5.1 – Comparaison des états thermodynamiques au point mort haut.

5.2.4.2 Du point de vue de l'aérodynamique

L'hypothèse d'auto-similarité du profil de vitesse en entrée de la chambre de combustion est forte et conditionne nécessairement le développement de l'écoulement durant les 29 ms de compression. Le but ici n'est donc pas de reproduire exactement l'écoulement observé expérimentalement, mais plutôt de décrire numériquement certaines de ses propriétés, de façon à obtenir une séquence d'admission représentative de la réalité et permettant d'inclure des effets d'histoire dans l'analyse physique. Les critères de validation du profil F^+ sont donc globaux.

Sur la figure 5.5, on compare les niveaux de la norme de la vitesse instantanée, obtenus par PIV, à ceux calculés par LES et résultant des quatre fonctions de formes proposées (*c.f.* figure 5.3). La PIV permet une mesure des composantes de la vitesse dans le plan défini par la nappe laser et de manière cohérente, seules les composantes de la vitesse dans le plan longitudinal représenté sur la figure 5.5 sont utilisées pour calculer la norme de la vitesse dans la LES 3D. Les comparaisons sont menées à quatre instants successifs à partir du PMH : $t = t_{TDC}$ ms, $t = t_{TDC} + 5$ ms, $t = t_{TDC} + 10$ ms et $t = t_{TDC} + 17$ ms.

Sauf pour la fonction de forme 2, les caractéristiques principales de l'écoulement étudié expérimentalement sont capturées par les LES : les conditions limites d'admission génèrent un écoulement le long de l'axe de la chambre de combustion ; celui-ci impacte la paroi supérieure de la chambre de combustion, les petites structures turbulentes ainsi créées remplissant peu à peu tout le volume de la chambre de combustion et favorisant la dissipation visqueuse de l'énergie cinétique turbulente. En outre, les niveaux de vitesses sont globalement mieux représentés en prescrivant les fonctions de forme 1 et 4. La fonction de forme 2 implique des niveaux beaucoup trop faibles, alors que la 3 en génère de trop importants, particulièrement pour les instants proches du PMH.

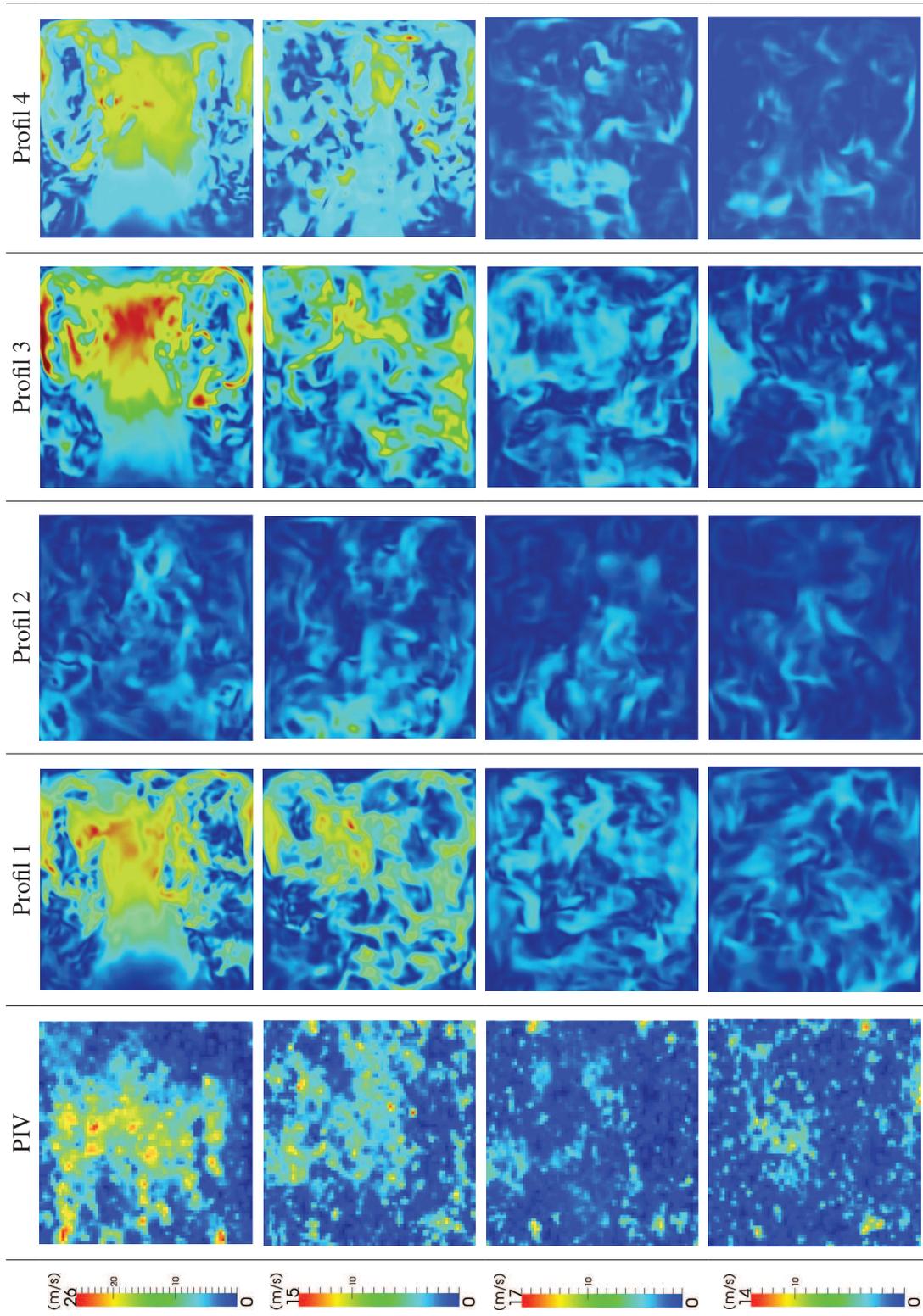


FIGURE 5.5 – Norme de la vitesse ($\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$) présentée sur une coupe transversale de la chambre de combustion, du haut vers le bas à $t = t_{TDC} \text{ ms}$, $t = t_{TDC} + 5 \text{ ms}$, $t = t_{TDC} + 10 \text{ ms}$ et $t = t_{TDC} + 17 \text{ ms}$.

De plus, 10 tirs PIV ont été effectués pour chacun des quatre instants, ce qui permet d'évaluer l'énergie cinétique turbulente moyenne dans la chambre de combustion. Pour des raisons évidentes de coût numérique, il n'est pas envisageable de répéter 10 fois le calcul pour calculer des quantités statistiques. Cependant, il est possible de tirer profit de l'axisymétrie de la configuration et d'effectuer les statistiques sur des anneaux dont l'axe est confondu avec celui de la chambre de combustion. L'hypothèse d'équivalence des statistiques obtenues expérimentalement et numériquement est également forte, d'autant plus que les résolutions spatiales atteintes par ces deux approches sont différentes ($\Delta_x^{PIV} = 0.5$ mm et $\Delta_x^{LES} = 0.24$ mm). La comparaison des quantités turbulentes globales caractérisant l'écoulement dans la chambre de combustion ne pourra donc porter que sur les tendances. Sur la figure 5.6, on présente, pour la PIV et les quatre LES, l'évolution de l'énergie cinétique turbulente moyennée sur tout le volume de la chambre de combustion, $\langle k \rangle^2$,

$$\langle k \rangle = 0.5(\langle \mathbf{u}^2 \rangle - \langle u \rangle^2).$$

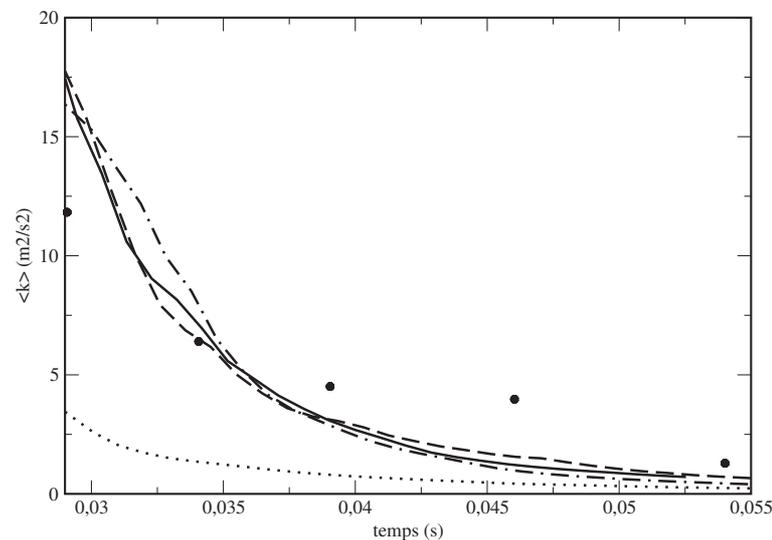


FIGURE 5.6 – Evolution, au cours du temps, à partir de l'instant du point mort haut, de l'énergie cinétique moyenne dans la chambre de combustion. PIV - ●. LES - Ligne continue : profil 1 ; points : profil 2 ; tirets : profil 3 ; points+tirets : profil 4.

Mis à part le cas du profil 2, les niveaux d'énergie cinétique turbulente obtenus numériquement sont du même ordre et montrent les mêmes tendances. Ils sont plus forts que ceux observés expérimentalement au PMH et deviennent inférieurs environ 7 ms après. Cette comparaison ne permet cependant pas d'arrêter le choix sur un profil particulier parmi les cas 1 et 4.

Finalement, un argument phénoménologique permet d'orienter le choix entre le profil 1 et le profil 4. En effet, les expérimentateurs reportent qu'aucun tourbillon toroïdal de coin n'est observé dans le cas où le plan d'admission de la chambre de combustion est muni de la grille de 69 trous. Le critère dit « de Rayleigh » précisé par le théorème de Fjortoft énonce que pour un profil de vitesse

1. monotone (c'est le cas des 4 profils par rapport à r),

2. Ici encore, seule les composantes de la vitesse appartenant au plan sont prises en compte.

2. présentant un point d'inflexion (th. Rayleigh) qui correspond à un maximum de vorticit  (th. de Fjortoft),

une instabilit  peut se d velopper³. Pour un profil axisym trique, cette instabilit  se manifeste par la g n ration d'un tore de Kelvin-Helmholtz (*i.e.* d'un tourbillon de coin ici). Pour s'assurer que ce ph nom ne a rodynamique n'apparaisse pas, il est donc n cessaire que F^+ ne pr sente pas de point d'inflexion ; c'est le cas du profil 4 uniquement (*c.f.* figure 5.3). Sur la figure 5.7, par l'interm diaire d'un scalaire passif valant 1 (noir) lorsque le gaz entre dans la chambre de combustion et 0 (bleu ciel) s'il y  tait initialement pr sent, on montre qu'une structure toro dale de Kelvin-helmholtz se d veloppe pour le profil 1 et pas pour le 4, qui est donc retenu dans la suite de l' tude num rique.

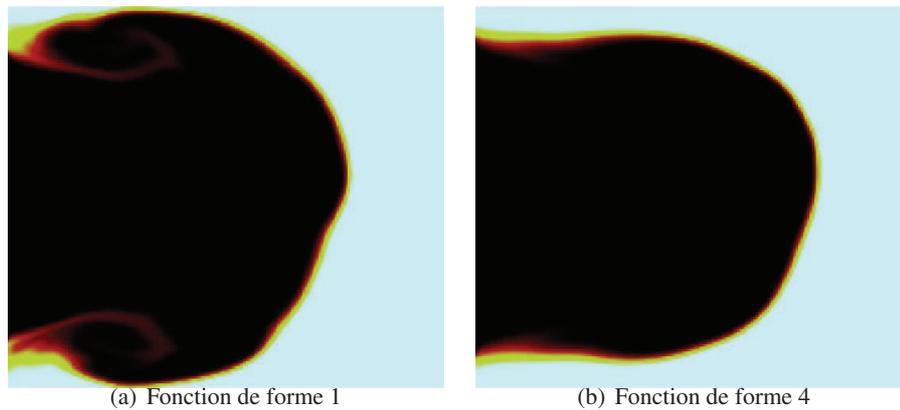


FIGURE 5.7 – Champ de scalaire passif pr sent  sur une coupe longitudinale de la chambre de combustion. En bleu ciel, le m lange est initialement pr sent dans la chambre de combustion ; en noir, il a inject  durant la phase d'admission.

5.3 Param tres de la DNS de l' coulement r actif

A cette  tape de l' tude, le volume de la configuration est r duit 64 fois, afin de rendre les calculs DNS abordables au vu des capacit s de calculs disponibles. En effet, les pas de temps num riques impos s en DNS par la taille des mailles, et par les ph nom nes acoustiques durant la phase de compression, puis par la chimie au moment de l'auto-inflammation, sont trop faibles pour pouvoir envisager l'int gration num riques des  quations de l'a rothermochimie sur un temps physique de l'ordre de 30 ms dans les 55 cm³ initiaux de la chambre de combustion. Il convient de mentionner que le principal int r t de cette  tude r side dans la possibilit  de rendre compte du couplage entre le champ a rodynamique g n r  par compression volum trique et la chimie de l'auto-allumage, dans des conditions aussi proches que possible de celles de l'exp rience. Ici, on ne cherche donc pas une reproduction num rique exacte de l'exp rience, la repr sentativit  d'une telle approche  tant, de toute fa on, limit e par la variabilit  inh rente   la turbulence.

3. cette condition est n cessaire, mais pas toujours suffisante

Les simulations numériques directes menées dans la suite sont effectuées sur un maillage de 70 136 136 de points (*resp.* 272 420) en 3D (*resp.* 2D), permettant d'atteindre une résolution spatiale de l'ordre de 20 μm . 4096 (*resp.* 512) processeurs d'une machine IBM Blue Gene/P ont été utilisés pour ces calculs.

5.3.1 Modélisation de la chimie

Concernant les phénomènes de transport moléculaire, les hypothèses faites dans le cas inerte sont maintenues ici. Une chimie globale est utilisée. Trois espèces, l'oxydant, le combustible et les produits de réactions sont impliquées dans la réaction de combustion, les fractions massiques associées étant notées respectivement Y_o , Y_f et Y_p . Le terme source des produits de réaction s'écrit

$$\dot{\omega}_{Y_p} = K_1 Y_f Y_o \exp(-T_{ac}/T), \quad (5.23)$$

où K_1 est la constante pré-exponentielle (en s^{-1}) et T_{ac} , la température d'activation (en K). La somme des fractions massiques des espèces impliquées valant 1, on a

$$Y_o = 1 - Y_f - Y_p \quad (5.24)$$

et donc

$$Y_f Y_o = Y_f(1 - Y_f - Y_p) = Y_f - Y_f^2 - Y_f Y_p. \quad (5.25)$$

En supposant que la combustion a lieu en régime très pauvre, il vient

$$\begin{aligned} Y_f &\ll Y_o, \\ Y_p &\ll Y_o. \end{aligned} \quad (5.26)$$

On peut alors négliger tous les termes quadratiques en Y_f et Y_p et on obtient

$$Y_f Y_o \approx Y_f. \quad (5.27)$$

En définissant une variable d'avancement normalisée c comme

$$c = 1 - \frac{Y_f}{Y_{feq}}, \quad (5.28)$$

on montre facilement que

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_{Y_p} &= K_1 Y_{feq} (1 - c) \exp(-T_{ac}/T) \\ &= K_2 (1 - c) \exp(-T_{ac}/T), \end{aligned} \quad (5.29)$$

où K_2 est la nouvelle constante pré-exponentielle. Le terme source de la variable d'avancement étant proportionnel à celui de Y_f en vertu de l'égalité 5.28, on obtient finalement que

$$\dot{\omega}_c = K(1 - c) \exp(-T_{ac}/T), \quad (5.30)$$

avec K la constante pré-exponentielle paramétrant le terme source de la variable d'avancement. Dans cette description simplifiée de la chimie, le terme source $\dot{\omega}_T$ est proportionnel à $\dot{\omega}_c$ et à Δh_c^0 , l'enthalpie de formation de c qu'on exprime comme

$$\Delta h_c^0 = c_p^{ref} T_{ref} \frac{\alpha}{1 - \alpha}, \quad (5.31)$$

où $\alpha = T_b - T_u/T_b$ est le facteur de dégagement de chaleur. On obtient l'expression suivante pour le terme source d'énergie :

$$\dot{\omega}_T = \Delta h_c^0 \dot{\omega}_c . \quad (5.32)$$

Cette description très simple des processus chimiques permet donc de décrire toute la combustion, uniquement en transportant la variable d'avancement normalisée c et l'énergie totale non-chimique. Les propriétés globales de l'auto-allumage généré par une compression rapide sont reproduites et les interactions entre la turbulence et le dégagement de chaleur peuvent être étudiées simplement. Cependant, il convient de garder à l'esprit qu'une seule échelle de temps ne saurait décrire les mécanismes chimiques réels. Les effets de flamme froide, qui peuvent être observés pour les hydrocarbures lourds, ne sont donc pas considérés dans la description numérique. Les conclusions des analyses des DNS n'auront donc de sens que d'un point de vue qualitatif.

5.3.2 Equations de transport utilisées pour le post-traitement des DNS

En tenant compte de toutes les hypothèses énoncées précédemment, l'équation générale de conservation de l'énergie 3.27 peut se réécrire plus simplement de la façon suivante

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{1}{\rho c_p} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{1}{c_p} \dot{\omega}_T + \frac{1}{\rho c_p} \frac{DP}{Dt} + \frac{1}{\rho c_p} \dot{S}_v , \quad (5.33)$$

ou sous forme équivalente,

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{1}{\rho c_v} \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + \frac{1}{c_v} \dot{\omega}_T - (\gamma - 1) T \nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{\overline{W}}{\rho \mathcal{R}} \dot{S}_v . \quad (5.34)$$

où $\dot{S}_v = \tau_{ij}(\partial u_i / \partial x_j)$ est la dissipation visqueuse, avec τ_{ij} , le tenseur des contraintes visqueuses. $D \bullet / Dt = \partial \bullet / \partial t + \mathbf{u} \cdot \nabla \bullet$ est la dérivée particulaire (ou lagrangienne). L'équation de transport de la variable d'avancement normalisée c s'écrit, conformément à l'hypothèse de nombres de Lewis unitaires

$$\frac{Dc}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot \left(\frac{\lambda}{c_p} \nabla c \right) + \dot{\omega}_c . \quad (5.35)$$

Ces équations seront utilisées pour effectuer le post-traitement des DNS.

5.3.3 Différents cas étudiés

Dans les DNS présentées ci-dessous, on a fixé $K = 2.9 \cdot 10^9 / t_{\text{TDC}}$. Deux températures d'activation ont été considérées : dans le cas (1), $T_{\text{ac}}^{(1)} / T_0 = 48$, alors que dans le cas (2), $T_{\text{ac}}^{(2)} / T_0 = 52$, avec $T_0 = 343$ K. L'auto-inflammation se produit à $\tau_{\text{ig}}^{(1)} = 0.0283$ s = 0.976 t_{TDC} , dans le cas (1) et à $\tau_{\text{ig}}^{(2)} = 0.0329$ s = 1.134 t_{TDC} , dans le cas (2). L'intensité turbulente à l'admission est de 10% dans les deux cas 3D (*c.f.* table 5.2). Dans le terme source de l'énergie $\dot{\omega}_T$, $\alpha = 0.7$, ce qui correspond à un dégagement de chaleur modéré, en cohérence avec l'hypothèse de combustion en pauvre.

Ces paramètres ont été choisis de façon à obtenir l'auto-inflammation autour du PMH. Un site dans l'écoulement est considéré comme allumé quand la variable de progrès atteint la valeur 0.05 ; après ce

	T_{ac}/T_0	τ_{ig}/t_{TDC}	$u'/U_o(t)$	3D/2D	Localisation de l'auto-allumage	Régime
Cas (1)	48	0.98	10%	3D	Dans une structure cohérente	Homogène
Cas (2)	52	1.13	10%	3D	A l'extérieur des structures	Localisé
Cas (3)	52	1.19	10%	2D	Dans une structure cohérente	Homogène
Cas (4)	48	0.98	30%	2D	A l'extérieur des structures	Localisé

TABLE 5.2 – Cas simulés. T_{ac} : température d'activation, $T_0 = 343$ K. τ_{ig} : délai d'auto-inflammation. $t_{TDC} = 29$ ms. $u'/U_o(t)$: intensité turbulente à l'admission ($U_o(t)$ calculé *via* l'équation 5.21).

seuil, en effet, la chimie domine le bilan et la combustion se développe systématiquement dans les simulations.

Dans ce qui suit, on définit un temps adimensionné par l'instant du point mort haut $t^* = t/t_{TDC}$.

5.4 Analyse des scénarios d'auto-allumage dans un milieu présentant des inhomogénéités de température

5.4.1 Description phénoménologique de l'écoulement et du champ de température à l'admission

La genèse de l'auto-inflammation dans une MCR est fortement dépendante de l'historique du champ de température. Il résulte des interactions entre la compression adiabatique, les phénomènes de transport moléculaires ou convectifs et les pertes thermiques aux parois. Une partie de l'analyse des simulations sera donc conduite par l'intermédiaire des équations de transport de la température 5.33 et 5.34. La contribution du terme non-isentropique \dot{S}_v est au moins trois ordres de grandeur plus faible que celles des autres termes des équations 5.33 et 5.34 ; elle est négligée ici ⁴.

Pendant la compression et avant l'auto-allumage, l'évolution lagrangienne de la température (DT/Dt) est induite, d'une part, par la compression volumétrique, et d'autre part, par les pertes thermiques aux parois et les inhomogénéités locales de l'écoulement. Ces mécanismes trouvent leur traduction mathématique dans l'équation 5.34 :

1. le premier terme du membre de droite mesure la contribution de la diffusion moléculaire ;
2. le second terme correspond à la production chimique de chaleur. Avant l'auto-inflammation et donc, avant le brusque dégagement de chaleur qui caractérise ce phénomène, ce terme est négligeable. Cependant, dans un prémélange parfait subissant une compression volumétrique, une très petite augmentation de température peut être suffisante pour générer l'emballement de la combustion ;
3. le troisième terme rend compte de la compression volumétrique globale et d'éventuels effets locaux de dilatation ou de compression. Ce terme agit comme une source d'énergie quand $\nabla \cdot \mathbf{u} < 0$.

La localisation des zones privilégiées d'auto-inflammation dépend donc du comportement du terme de diffusion et des fluctuations locales de la divergence du champ de vitesse. Ainsi, on s'attend à ce que

4. Bien entendu, dans les simulations numériques présentées dans ce chapitre, l'équation de l'énergie est résolue sous sa forme complète 3.27, les équations simplifiées 5.33 et 5.34 ne sont introduites qu'à des fins de post-traitement.

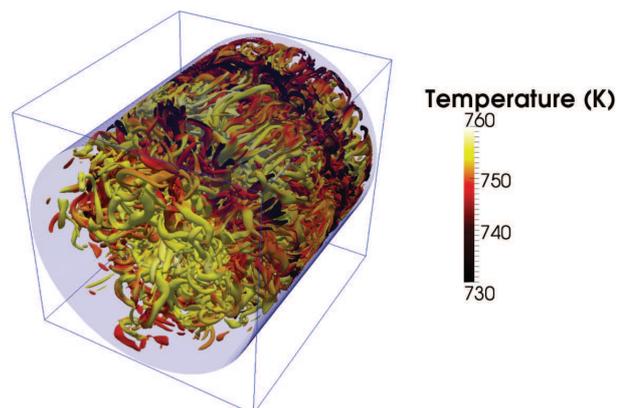
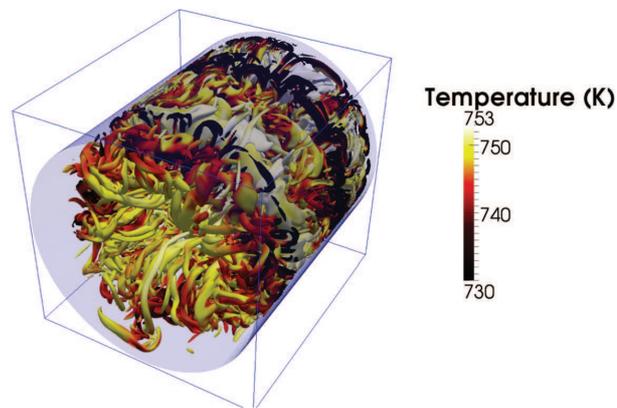
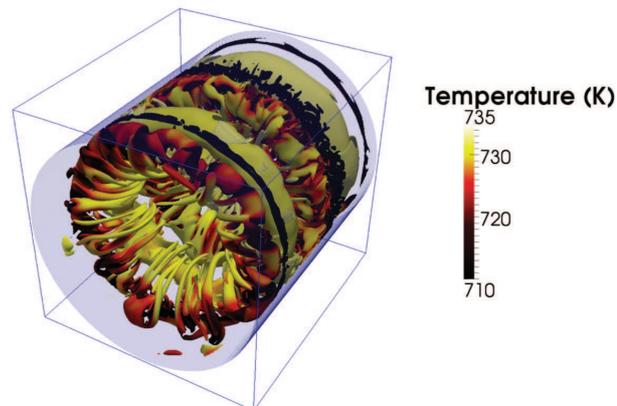
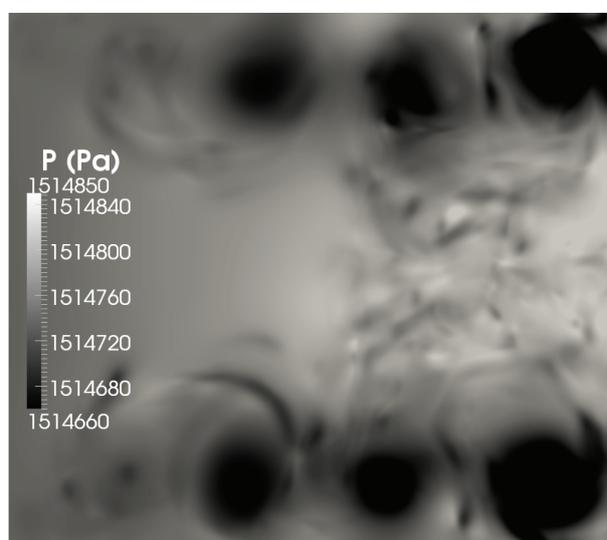
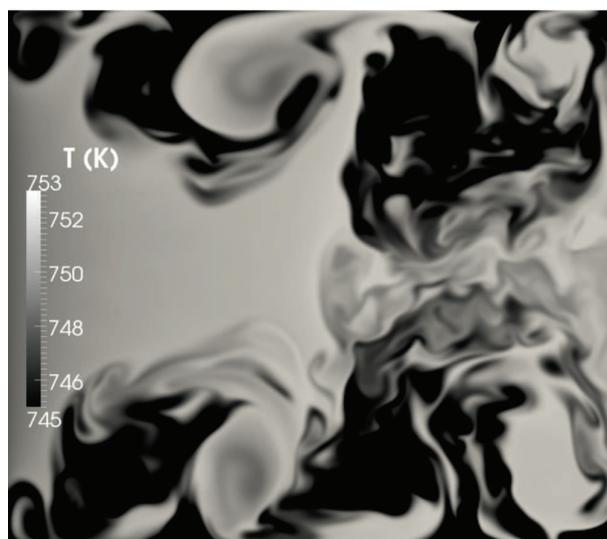


FIGURE 5.8 – Iso-contour du critère Q ($Q = 15 \cdot 10^6 \text{ s}^{-2}$) coloré par la température, cas (2). Le plan d'admission est à gauche.



(a) Pressure



(b) Temperature

FIGURE 5.9 – Coupes longitudinales de la pression et de la température. Cas (2), $t^* = 0.94$.

le développement de l'auto-inflammation soit dépendant des échelles caractéristiques de la turbulence et des fluctuations de température.

La figure 5.8 montre les structures turbulentes colorées par la température dans le cas (2)⁵. Elles sont visualisées par l'intermédiaire du critère Q , où $Q = 0.5(\Omega_{ij}\Omega_{ij} - S_{ij}S_{ij})$, avec Ω_{ij} et S_{ij} correspondant respectivement aux composantes antisymétrique et symétrique du tenseur des déformations $\partial u_i / \partial x_j$ [25]. Au voisinage du PMH, la topologie de l'écoulement subit des modifications significatives. En effet, des structures toroïdales de Kelvin-Helmholtz sont présentes à $t^* = 0.94$ (*c.f.* figure. 5.8-a) ; ces structures se déstabilisent ensuite lorsque le cylindre atteint le PMH et donc lorsqu'elles ne sont plus entretenues par l'admission de fluide ; pour finir, toute l'énergie cinétique turbulente qu'elles concentraient, cascade et est spatialement redistribuée de façon quasi-homogène dans tout le volume de la chambre de combustion à $t^* = 1.07$ (*cf* figure 5.8-c).

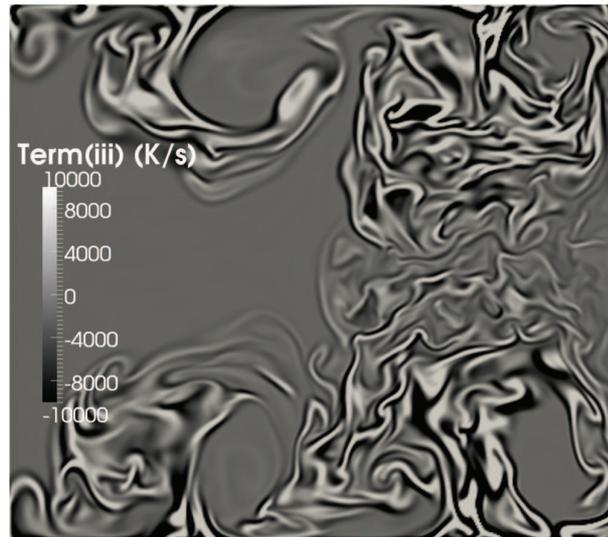
Les gros tourbillons de Kelvin-Helmholtz sont visibles à travers leur impact sur le champ de pression, représenté sur la figure 5.9. Leur localisation coïncide avec une baisse de pression qui maintient leur cohérence. A l'instant $t^* = 0.94$, avant l'auto-allumage, au centre de la chambre de combustion, des fluctuations de pression liées aux petites structures turbulentes se déplacent de la paroi supérieure vers le plan d'admission et ces structures mélangent des zones froides avec des zones chaudes, comme on l'observe sur la figure 5.9-b. A cet instant, un coeur adiabatique est encore préservé du transport turbulent de la température : celui-ci ne subit que l'effet de la compression adiabatique globale. A cet instant, $\dot{\omega}_T$ est plus de deux ordres de grandeurs inférieurs aux autres termes des membres de droite des équations 5.33 et 5.34.

Globalement, la contribution du terme de diffusion domine le long des iso-surfaces de température très plissées (*c.f.* figure 5.10-a), avec, plus marginalement, des effets locaux de compression ou dilatation induits par les mouvements turbulents à petite échelle (*c.f.* figure 5.10-b). Dans certaines régions, les termes de diffusion et de compression/dilatation sont du même ordre de grandeur, l'évolution lagrangienne de la température résultant alors de la compétition entre ces deux termes. Toujours à cet instant particulier, la région proche de l'axe de la chambre de combustion et située dans la portion de la chambre adjacente au plan d'admission, correspondant au coeur adiabatique, n'est pas affectée par les flux diffusifs de chaleur, ni par les fluctuations locales de la divergence de la vitesse. On constate également que le coeur des structures turbulentes est lui aussi préservé des flux diffusifs de chaleur.

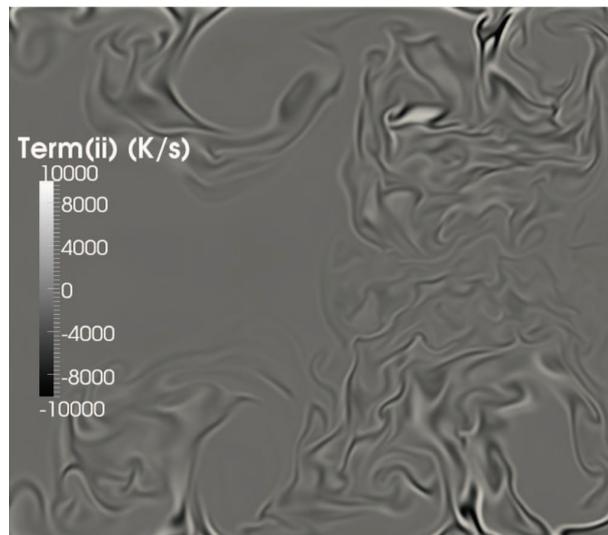
La corrélation entre les fluctuations de la divergence de la vitesse et la position par rapport aux structures turbulentes caractérisées par des niveaux élevés de Q , est mise évidence sur le scatter plot 5.11, extrait peu avant l'auto-inflammation. On y voit que les faibles amplitudes de $\nabla \cdot \mathbf{u}$ sont indépendantes de la position dans l'écoulement, et sont donc observées sur toute la gamme de valeur du critère Q , alors que les grandes amplitudes de $\nabla \cdot \mathbf{u}$ correspondent aux faibles valeurs de critère Q et sont donc situées à l'extérieur des structures.

A cette étape préliminaire de l'analyse, les observations suggèrent que les sites privilégiés de l'auto-inflammation sont localisés, soit au centre d'une structure cohérente de Kelvin-Helmholtz qui isole ther-

5. Comme la même intensité turbulente paramétrise la séquence d'admission dans les deux cas, les mêmes comportements sont observés dans le cas (1) avant tout dégagement de chaleur significatif.



(a) Terme de diffusion de l'équation (5.34)



(b) Terme de compression/dilatation de l'équation (5.34)

FIGURE 5.10 – Coupe longitudinale de l'intensité des termes de diffusion et de compression/dilatation de l'équation (5.34). Cas (2), $t^* = 0.94$.

miquement la portion de fluide qu'elle piège du reste de l'écoulement, soit à l'extérieur de ces structures, dans des zones de compression locales où $\nabla \cdot \mathbf{u} < 0$. Ainsi, si l'on souhaite que l'auto-allumage se produise au coeur d'un tore de Kelvin-Helmholtz, celui-ci doit avoir un temps de vie suffisamment long, typiquement plus grand que τ_{ig} , pour qu'il maintienne son effet d'isolation thermique jusqu'à l'instant de l'auto-allumage. Un comportement similaire est reporté par Thevenin et Candel [116] dans le cas d'un mélange présentant des inhomogénéités de composition.

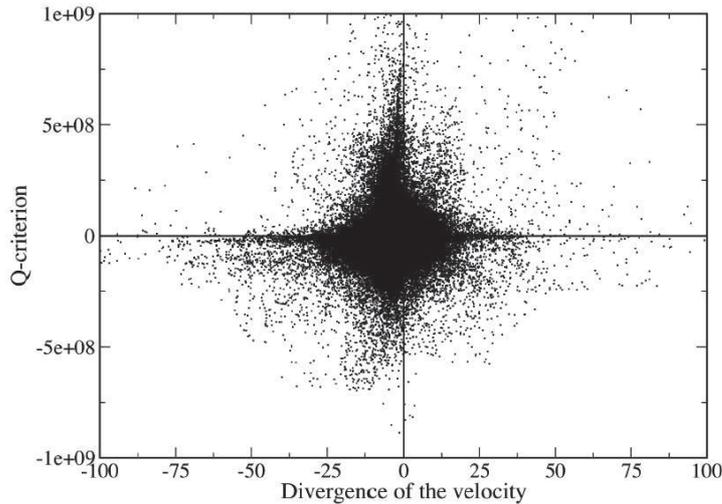


FIGURE 5.11 – Critère Q (en s^{-2}) vs divergence de la vitesse (en s^{-1}). Cas (2), $t^* = 0.94$.

5.4.2 Auto-allumage en régime homogène ou fragmenté

Sur la figure 5.12, on montre le champ de température dans un plan transverse, à la position longitudinale où l'auto-inflammation s'emballe en tout premier lieu, pour les cas (1), à gauche, et (2), à droite. Dans le cas (1), l'auto-inflammation se produit dans la seconde moitié de la chambre de combustion ($x = 0.95$ cm), dans une région proche de la paroi supérieure, alors que dans le cas (2), la combustion s'initie dans la première moitié de la chambre, au voisinage du plan d'admission ($x = 0.15$ cm).

Dans le premier cas (*c.f.* figure 5.12-a), pour lequel le délai d'auto-inflammation est le plus court, l'augmentation subite de température (environ 100 K au dessus de la température de compression adiabatique) est principalement visible sur la zone homogène inférieure-droite de la coupe, dans une zone de l'écoulement encore marquée par la présence d'une structure de Kelvin-Helmholtz. De fortes fluctuations de température existent à cet instant, comme on peut l'observer dans les zones encore en cours d'initiation. Dans ce cas, la compression volumétrique résulte en un auto-allumage quasi-homogène au sein d'une structure toroïdale de Kelvin-Helmholtz. Ce comportement est encore illustré sur la figure 5.13 (ligne pleine), où l'on observe de multiples maxima locaux de température, correspondant à de petits volumes, ainsi que des plateaux à hauts niveaux de température, correspondant à des volumes d'extension spatiale conséquente. Les gradients de température sont particulièrement marqués dans ce cas.

Dans le second cas, compte-tenu d'un délai d'auto-inflammation plus long, un temps plus important s'est écoulé avant que le brusque dégagement de chaleur de l'auto-inflammation ne débute. Ici, les fluctuations de température sont bien réduites et les gradients moins raides, comme l'atteste la courbe pointillée sur la figure 5.13. On remarque, sur la figure 5.12-b, que l'auto-inflammation se produit d'une manière bien différente du premier cas. La brusque augmentation de température caractéristique du phénomène a lieu au sein d'un petit volume. Des petites augmentations très localisées de la température du fluide, éventuellement induites par des fluctuations de la divergence de la vitesse, jouent, dans ce cas, un rôle décisif dans l'auto-inflammation.

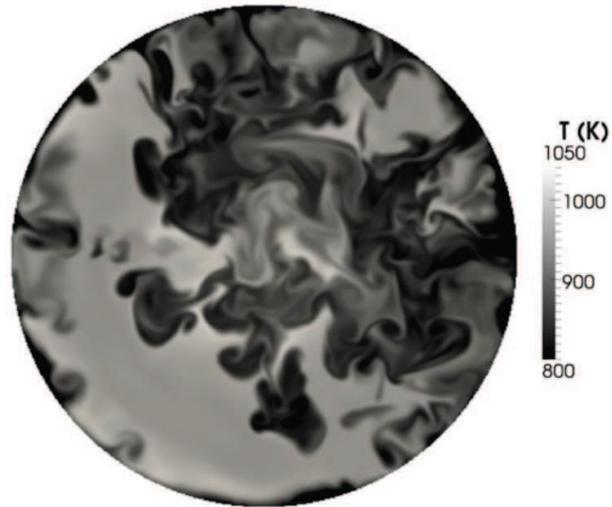
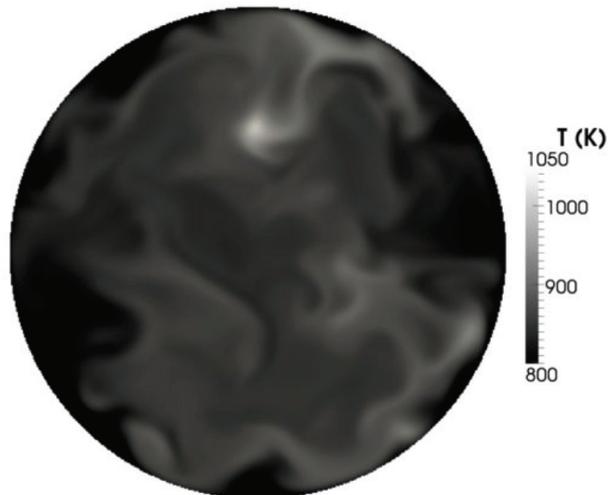
(a) cas (1) à $t^* = 0.981$ (b) cas (2) à $t^* = 1.375$

FIGURE 5.12 – Coupes transversales du champ de température au niveau des premiers sites d'auto-inflammation. (a) : $x = 0.95$ cm. (b) : $x = 0.15$ cm

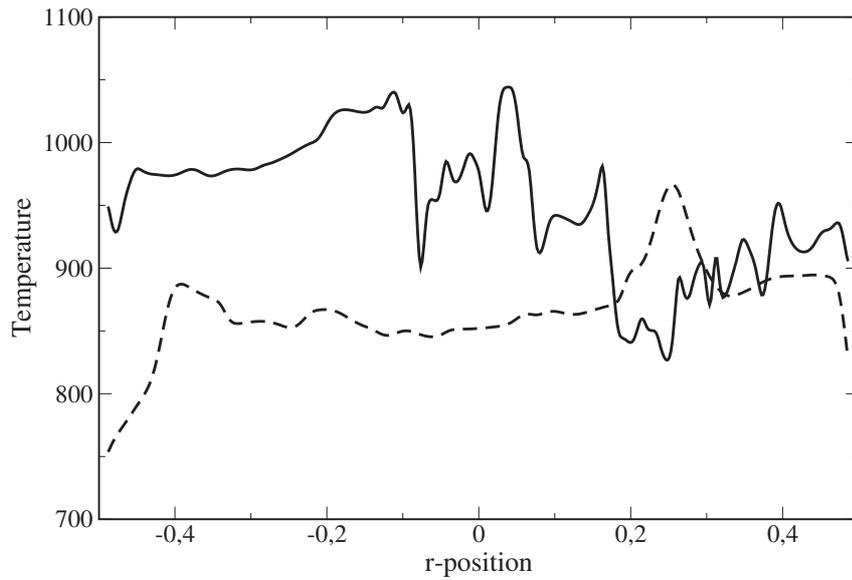


FIGURE 5.13 – Profils de température passant par les centres des sections de coupe présentées sur la figure 5.12 (position en cm). Ligne pleine : cas (1), coupe horizontale. Ligne pointillée : cas (2) coupe verticale.

Il est également important de noter que l'auto-allumage dans le cas (1) génère une onde de pression dont l'amplitude est élevée ($\Delta P \sim 10^4$ Pa) alors que celle observée dans le cas (2) est d'amplitude beaucoup plus modérée ($\Delta P \sim 200$ Pa), comme le montre la figure 5.14.

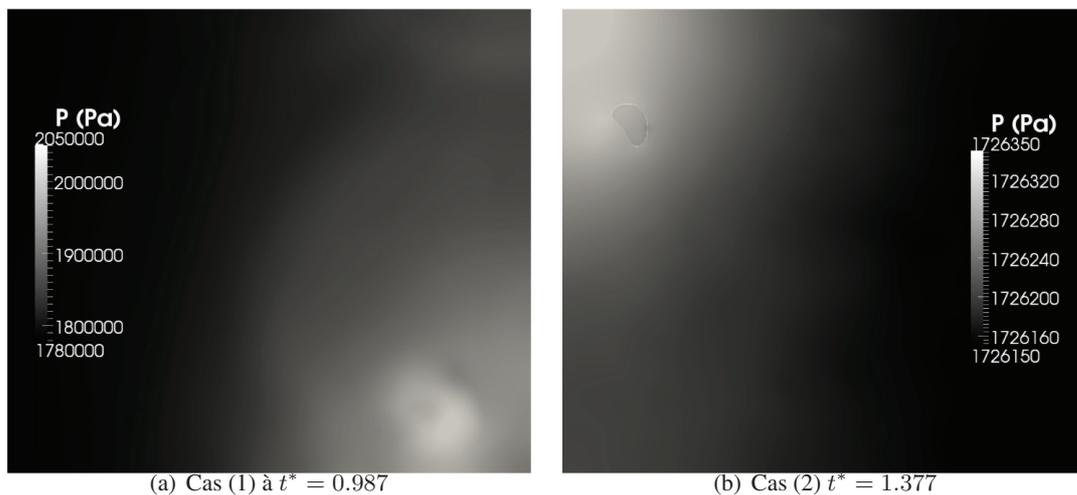


FIGURE 5.14 – Coupe longitudinale de la chambre de combustion. Champs de pression pendant l'auto-allumage dans les deux cas 3D.

Dans la suite, les mécanismes responsables d'augmentations locales de la température sont analysés dans des simulations numériques directes 2D, qui sont particulièrement utiles pour isoler l'impact sur le

champ de température des structures turbulentes. En effet, leur cohérence est artificiellement renforcée par le fait que l'étirement tourbillonnaire, dont l'effet est déstabilisateur, n'existe pas dans un écoulement bidimensionnel. Les mécanismes induits par les tourbillons 2D pourront être généralisés en 3D pour les structures axisymétriques de Kelvin-Helmholtz.

5.4.3 Analyse des mécanismes d'initiation et de propagation de l'auto-allumage dans un écoulement 2D

5.4.3.1 Les cas 2D

En 2D, les mêmes mécanismes d'auto-allumage que ceux observés en 3D sont également impliqués dans l'initiation et le développement de l'auto-inflammation, mais pour des paramètres aérodynamiques (*i.e.* intensité turbulente à l'admission) et chimiques différents.

Dans cette étude 2D, il a été décidé de préserver les délais d'auto-inflammation des cas 1 et 2 (Table 5.2). Les conditions de chimie et de turbulence du cas (2) 3D sont transposées au cas (3) 2D. Dans ce calcul, l'auto-inflammation est alors obtenu à $\tau_{ig}^{(3)} = 1.187 t_{TDC}$; cependant, elle s'initie au centre d'une structure turbulente, alors que le contraire est observé en 3D. De plus, en 2D, l'auto-allumage est favorisé au centre des structures qui sont artificiellement stables. Pour obtenir en 2D un auto-allumage en dehors des structures, il a été nécessaire d'augmenter l'intensité turbulente d'admission à 30%, comme pour le cas (4), dans lequel l'auto-allumage se produit lieu à $\tau_{ig}^{(4)} = 0.970 t_{TDC}$. Ceci limite certainement le caractère générique de simulations numériques directes 2D utilisant une chimie détaillée. Les scénarios 2D d'initiation et de développement de l'auto-inflammation sont présentés dans la suite.

5.4.3.2 Scénarios d'initiation et de développement de l'auto-inflammation

Les figures 5.15-a et -b montrent que le terme source chimique est maximal au centre des structures tourbillonnaires dans le cas (3), l'inverse étant observé dans le cas (4). Avant l'auto-inflammation dans le cas (3) (*c.f.* images de gauche sur la figure 5.15), le dégagement de chaleur est maximal dans une zone où la pression est localement minimale (*c.f.* figure 5.15-c), correspondant au coeur d'un tourbillon cohérent, comme le confirme l'iso-contour de critère Q (*c.f.* figure 5.15-e et -f). Le taux de dissipation scalaire de la température $\rho\chi_T = (\lambda/C_p)|\nabla T|^2$ est maximal dans les zones bordant les structures, où le mélange est intense, et où le dégagement de chaleur est plus faible à cause de la contribution négative des flux diffusifs induits par les pertes thermiques aux parois. Ainsi, dans le cas (3), le coeur des tourbillons apparaît comme isolé thermiquement du reste de l'écoulement et l'auto-inflammation s'initie préférentiellement à cet endroit. Dans le cas (4), les fluctuations de la turbulence sont beaucoup plus marquées et un mécanisme de compression localisé, induit par des inhomogénéités du champ de vitesse, est responsable de l'augmentation de température menant finalement à l'auto-inflammation. Ce mécanisme est illustré par la figure 5.16, extraite de la simulation numérique directe du cas (4) à l'instant et à l'endroit où la chimie de l'auto-inflammation s'emballe. Le mélange est entraîné par deux structures cohérentes contrarotatives ; entre elles, il est accéléré à cause de la constriction des lignes de courant. Le confinement de la configuration ainsi que la compressibilité du fluide empêchent le débit volumique d'être parfaitement conservé, comme on l'observerait dans un écoulement incompressible et en conséquence, la vitesse débitante entre ces deux tourbillons est inférieure à celle que l'on observerait en incompressible. On a alors $\nabla \cdot \mathbf{u} < 0$, ce qui se traduit par une augmentation locale de la température,

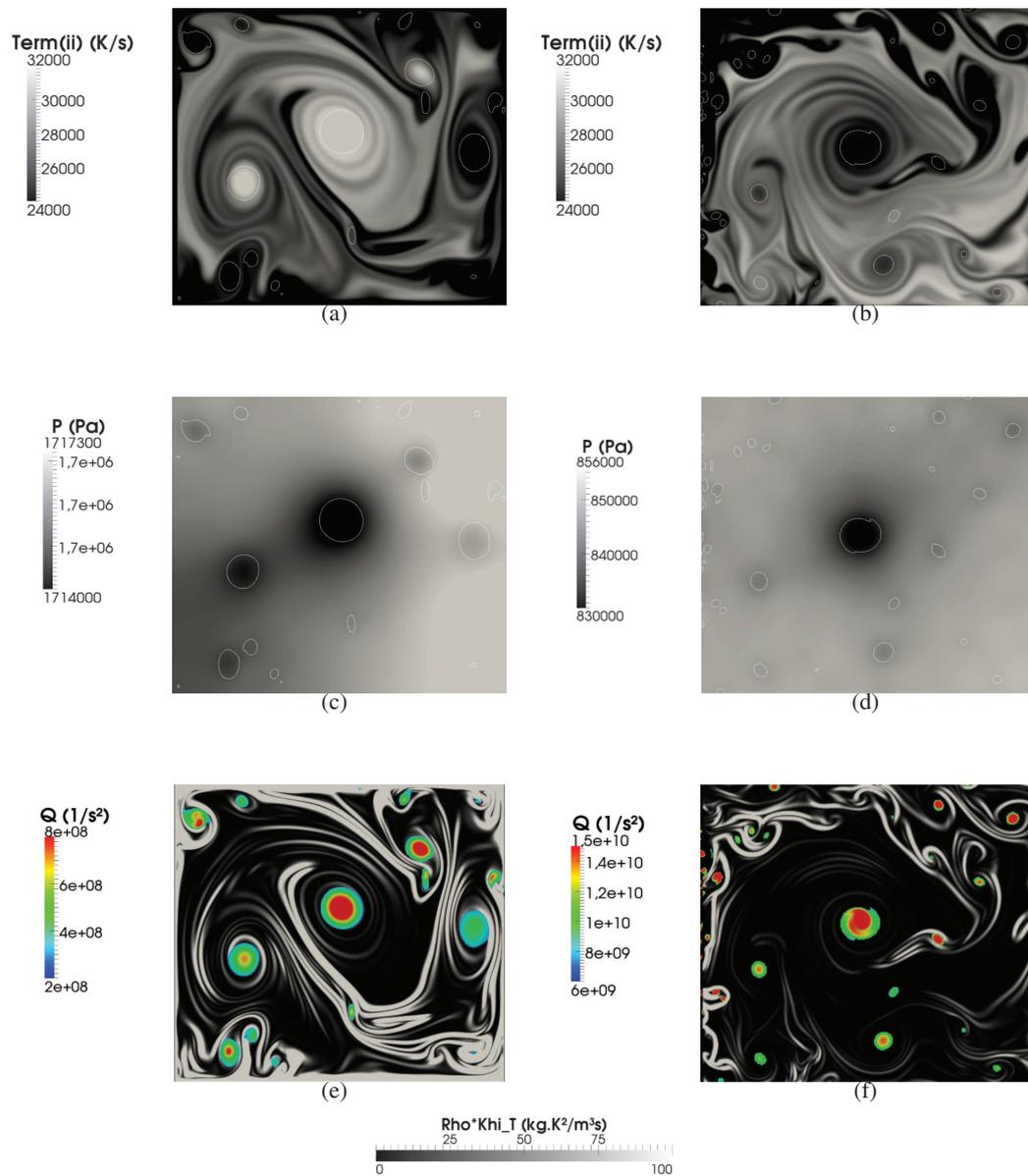


FIGURE 5.15 – Champs issus des simulations 2D. (a) - (b) : terme source chimique dans l'équation (5.34), lignes : iso-Q. (c) - (d) : pression en niveaux de gris, ligne : iso-Q ((c) : $Q = 6 \cdot 10^9 \text{ s}^{-2}$, (d) : $Q = 2 \cdot 10^8 \text{ s}^{-2}$). (e) - (f) : intensité de $\rho\chi_T$ en niveaux de gris, intensité du critère Q en couleurs. Gauche : cas (3) à $t^* = 1.187$. Droite : cas (4) à $t^* = 0.9705$.

par l'intermédiaire du troisième terme du membre de droite de l'équation 5.34 qui agit comme un terme source ($-(\gamma - 1)T\nabla \cdot \mathbf{u} > 0$).

Comme Zel'dovich l'a montré [133] (*c.f.* section 2.2.2), dans un milieu homogène en composition, la topologie du champ de température juste avant l'auto-allumage joue un rôle déterminant dans la sélection du régime de propagation de l'auto-inflammation. Il a notamment montré que, sous certaines conditions,

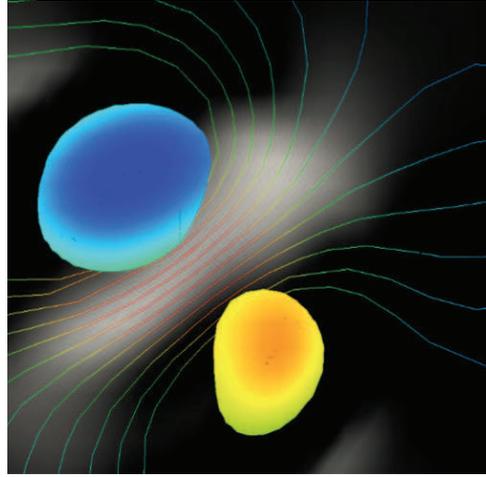


FIGURE 5.16 – Illustration du mécanisme de compression local extrait du cas (4). Couleurs : vorticité seuillée, deux tourbillons contrarotatifs. Lignes : lignes de courant . Niveau de gris : intensité du termes de compression/dilatation dans l'équation (5.34) (elle augmente du noir vers le blanc).

un couplage constructif entre la chimie de l'auto-inflammation et l'acoustique pouvait se produire et aboutir à la génération d'une forte onde de pression, voire d'une onde de détonation, si l'extension spatiale sur laquelle ce phénomène résonnant se développe est suffisamment grande. Sur la figure 5.17, on illustre l'impact de l'auto-allumage des cas (3) et (4) sur le champ de pression. Alors que dans le cas (3), l'onde de pression générée est très étalée et de faible amplitude ($\Delta P = 200$ Pa, *c.f.* figure 5.17, à gauche), elle est, dans le cas (4), beaucoup plus raide et d'amplitude beaucoup plus importante ($\Delta P \sim 10^4$ Pa, *c.f.* figure 5.17, à droite). En outre, dans le cas (4), l'augmentation de pression générée par le passage cette onde est suffisamment forte pour que son passage provoque l'allumage par compression d'autres sites éloignés du premier.

La distribution spatiale du délai d'auto-inflammation τ_{ig}^o au sens de Zel'dovich est difficile à suivre directement : elle dépend implicitement des historiques croisés de toutes les grandeurs aérothermochimiques dans la chambre de combustion de la MCR⁶. Cependant, il est possible d'assimiler la vitesse de propagation du front d'auto-inflammation à la vitesse de déplacement des iso-surfaces d'un scalaire subissant la réaction, de la manière proposée par Chen *et al.* [12]. Ici, on considère que l'onde d'auto-inflammation se propage à la vitesse de déplacement relative S_d des iso-surfaces de température. Celle-ci est reliée à la vitesse de déplacement absolue \mathbf{u}_{abs} et à la vitesse de l'écoulement par l'égalité

$$\mathbf{u}_{abs} = \mathbf{u} + S_d \mathbf{n}. \quad (5.36)$$

S_d peut être calculée en utilisant sa définition basée sur l'équation de champ [62, 104]

$$S_d = \frac{1}{|\nabla T|} \frac{DT}{Dt}. \quad (5.37)$$

L'équation 5.37 confirme que plus les gradients de température sont faibles, plus la vitesse de déplacement relative, identifiée dans cette étude à la vitesse de propagation spontanée de Zel'dovich u_{sp} , est élevée.

6. Un modèle de reconstruction basée sur l'hypothèse des réacteurs homogènes sera développée dans la section 5.4.3.3.

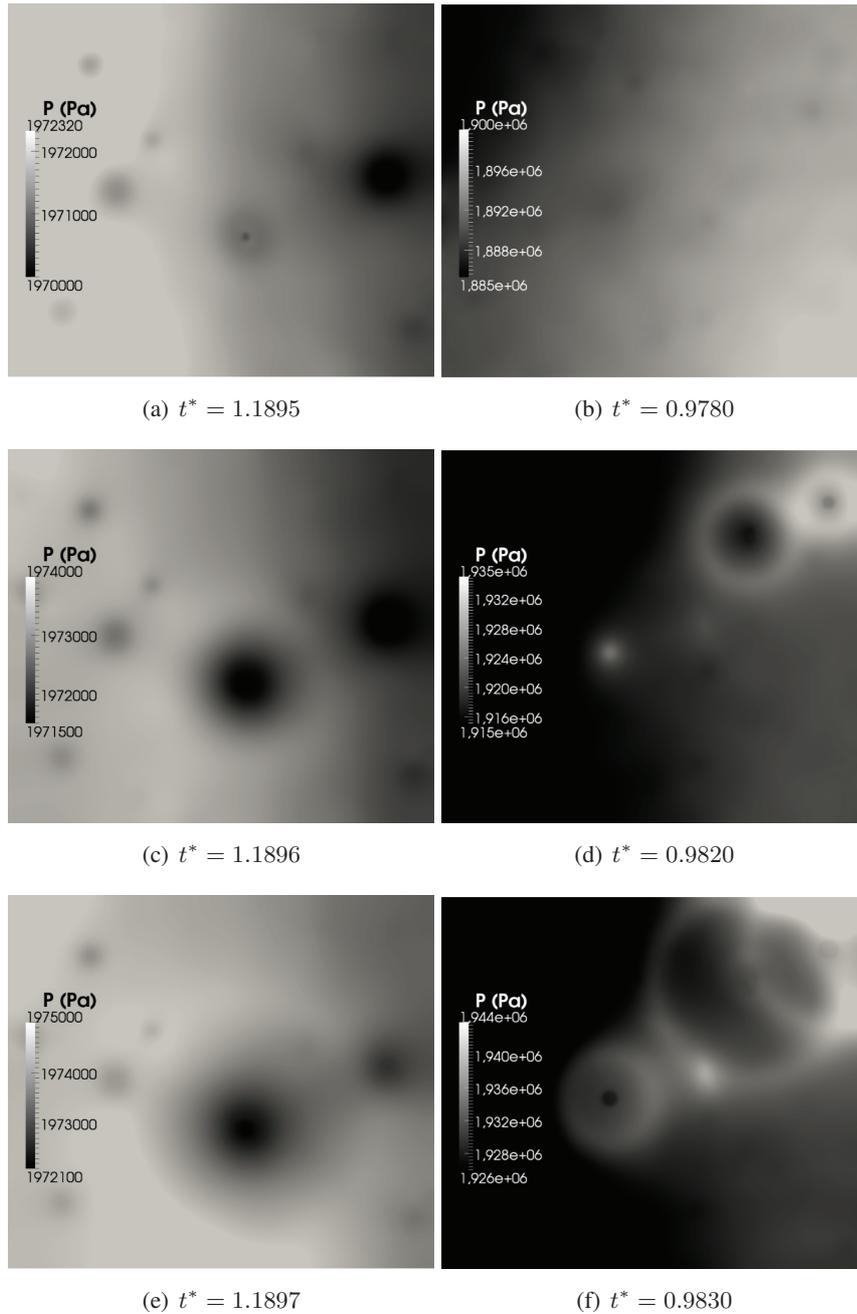


FIGURE 5.17 – Champs de pression des cas 2D. Gauche : cas (3). Droite : cas (4).

On retrouve, par ailleurs, le cas limite de l'auto-allumage en volume quand $|\nabla T| \rightarrow 0$, correspondant à $S_d \rightarrow +\infty$ (*i.e.* $u_{sp} \rightarrow +\infty$). Sur la figure 5.18 est présenté un scatter plot S_d vs a , la vitesse du son. Seuls les points de l'écoulement où la variable d'avancement est supérieure à 0.01 sont représentés ici. Les données sont extraites des cas 2D (3) et (4), à l'instant de leur auto-allumage respectif ($t_3^* = 1.1895$ et $t_4^* = 0.9710$). A l'analyse de ce scatter plot, deux remarques s'imposent :

1. les niveaux de S_d observés dans le cas (4) sont plus élevés que dans le cas (3) ;
2. les niveaux de S_d sont proches de la vitesse du son dans le cas (4).

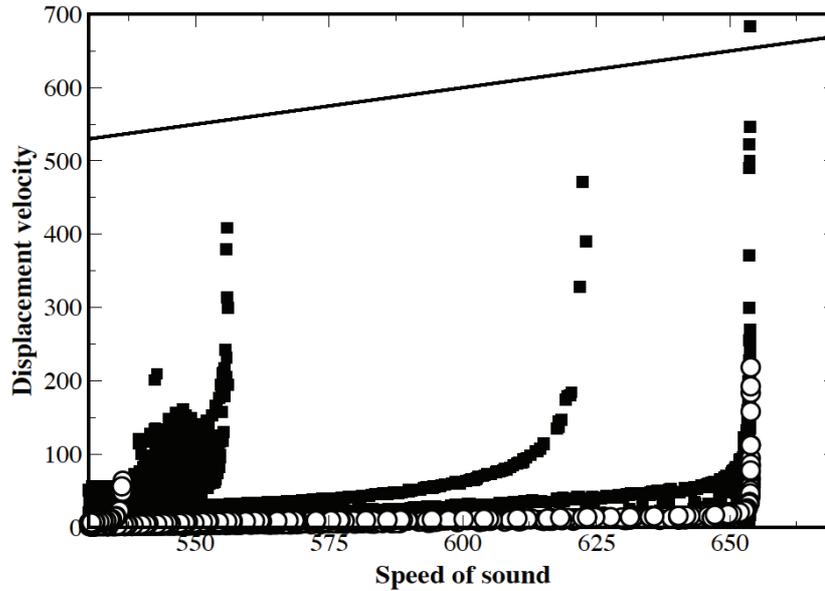


FIGURE 5.18 – Vitesse de déplacement relatif (c.f. équation 5.37) vs vitesse du son (m/s). Cercles : cas (3) at $t^* = 1.1895$. Carrés : cas (4) at $t^* = 0.9710$. Ligne : bissectrice du plan.

Ces deux points expliquent le comportement du champ de pression reporté sur la figure 5.17, si on les met en perspective avec l'analyse de Zel'dovich. Dans le cas (3), le front de réaction chimique se propage beaucoup plus lentement que les ondes des pressions à cause de la contribution négative de la diffusion. En effet, l'auto-allumage ayant lieu tardivement après le PMH, la diffusion moléculaire a eu le temps d'affecter tout le volume de la chambre de combustion, même les zones de l'écoulement piégées au centre des structures cohérentes où elle a été ralentie. En effet :

- par comparaison avec le reste de l'écoulement, les structures cohérentes sont moins affectées par les pertes thermiques, ce qui explique qu'elles demeurent des sites privilégiés par l'auto-allumage ;
- cependant, l'auto-allumage ayant lieu tardivement, la diffusion moléculaire de la chaleur affecte tout de même le fluide piégées par ces structures. Ainsi, en même temps qu'elle lisse les gradients de température, elle réduit l'extension spatiale des zones homogènes, jusqu'à ce que ces dernières n'existent plus. Ce mécanisme est schématisé sur la figure 5.19. En conséquence, dans le cas (3), les zones où la température est maximale ne présentent plus de plateau. Ce comportement est également observable en 3D sur la figure 5.13 (ligne pointillée), présentée précédemment. Dans les zones où la température est maximale, il a pour effet d'augmenter $|\nabla T|$ et la contribution négative de la diffusion, et ainsi, de diminuer S_d . L'auto-allumage se produit alors très localement (c.f. figure 5.12-b).

Dans le cas (4) cependant, l'auto-inflammation a lieu plus tôt. La diffusion moléculaire de la chaleur n'a pas eu le temps d'affecter les zones homogènes, qui sont donc caractérisées par $|\nabla T|$ très faible. Ce comportement est également observé en 3D, dans le cas (1) qui montre un délai d'auto-inflammation très similaire au cas (4), comme l'atteste la figure 5.13 (ligne pleine) Ainsi, on observe sur la DNS du cas (4) que la vitesse du front d'auto-inflammation est proche de celle du son, ce qui entraîne un couplage résonnant entre acoustique et chimie, selon le mécanisme mis en évidence par Zel'dovich. De fortes ondes de pression sont alors générées par l'auto-allumage dans le cas (4) en 2D, ou le cas (1) en 3D, les

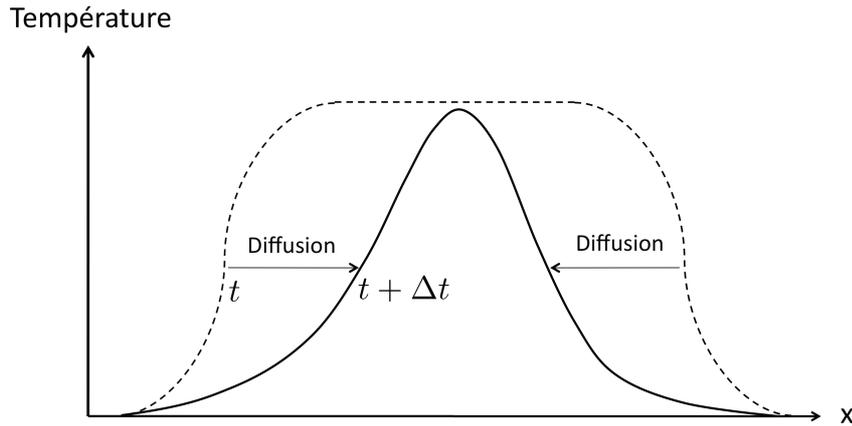


FIGURE 5.19 – Schéma de l'impact de la diffusion de la chaleur sur les zones homogènes de température, résultant en un auto-allumage localisé.

délais d'auto-inflammation dans ces deux cas étant très proches.

Cependant, une propriété essentielle de l'auto-allumage les différencie : en 2D (cas (4)), l'auto-inflammation a lieu à l'extérieur des structures cohérentes, dans une zone également homogène en température, alors qu'en 3D (cas(1)), elle s'initie au coeur de l'une d'entre elles. Cette différence s'explique par les intensités turbulentes différentes à l'admission. Dans le cas (4), celle-ci est très élevée (30% contre 10% dans le cas (1)), ce qui génère de hauts niveaux de vorticités, accompagnés de diminutions non-négligeables de pression au centre des structures. Ces baisses locales de pression sont suffisantes pour diminuer significativement la température, par l'intermédiaire de la loi des gaz parfaits, et donc l'amplitude du terme de dégagement de chaleur chimique (*c.f.* figure 5.15-b). Ainsi, dans le cas (4), le mécanisme d'isolation thermique ne favorise pas l'auto-inflammation ici, dans la mesure où les zones piégées par les tourbillons sont froides. La contribution de la compression locale entre les structures, dont le mécanisme est présenté sur la figure 5.16, est ici décisive pour l'auto-inflammation. De manière consistante avec cette observation, en effectuant le calcul du cas (4) avec une intensité turbulente diminuée à 10%, l'auto-allumage se produit au centre d'une structure. Bien entendu, des fortes ondes de pression sont également générées ; elles caractérisent l'auto-inflammation dans un milieu spatialement homogène d'un point de vue thermodynamique.

On synthétise ici les principales observations ressortant de l'analyse des quatre simulations numériques directes présentées dans ce qui précède.

Trois mécanismes essentiels participent à l'augmentation, locale ou globale, de l'énergie interne dans un mélange homogène en composition et subissant une compression rapide et une interaction avec des parois froides :

1. la compression volumétrique du gaz par le piston augmente en masse la température de tous les volumes fluides de la chambre de combustion ;
2. la diffusion moléculaire refroidit localement les zones les plus réactives. Sa contribution est donc systématiquement négative dans la sélection des sites d'auto-allumage. On a pu constater qu'elle était plus faible au coeur des structures cohérentes, ce qui peut donc favoriser l'auto-allumage à

cet endroit ;

3. des phénomènes de compression locale induits par les détails fins de l'écoulement turbulent, et se manifestant par des fluctuations négatives de la divergence de la vitesse, peuvent jouer un rôle décisif dans la sélection du noyau d'auto-inflammation. Ils se développent entre les structures turbulentes et favorisent donc l'auto-allumage en dehors de leur coeur.

Deux régimes d'auto-allumage ont été identifiés :

1. si $\tau_{ig} \ll \tau_m$, l'auto-inflammation se produit en régime homogène, dans des régions maintenues isolées thermiquement du reste de l'écoulement, telles le coeur des structures turbulentes cohérentes (tores de Kelvin-Helmholtz dans le cas (1) 3D ou tourbillons 2D dans le cas (4) avec 10% d'intensité turbulente en admission), ou plus généralement, dans des zones où les champs thermo-chimiques sont peu affectés par la diffusion moléculaire et turbulente de la température. Le terme « homogène » signifie ici que l'extension spatiale sur laquelle l'auto-allumage se produit est grande. Ainsi, sur la base de l'analyse de Zel'dovich, durant l'auto-allumage homogène, il est très probable que de fortes ondes de pression soient générées ;
2. si $\tau_{ig} \gg \tau_m$, l'auto-inflammation se produit en régime localisé et revêt un caractère beaucoup plus stochastique ; tous les petits détails de l'écoulement turbulent participent à la sélection du site d'auto-inflammation. Dans ce cas, la diffusion moléculaire a détruit toutes les éventuelles zones homogènes où la température était maximale ; l'auto-allumage résultant a lieu sur des zones de volumes très réduits, sans génération d'onde de pression significative.

Plus tard dans ce chapitre, on utilisera ces observations afin de construire un diagramme des régimes d'auto-inflammation.

5.4.3.3 Ecarts au comportement des réacteurs homogènes

Pour un réacteur homogène (*i.e.* pas de phénomène de diffusion), à pression constante ($DP/Dt = 0$ dans l'équation 5.33), l'équation 5.33 se réduit donc à

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{1}{c_p} \dot{\omega}_T, \quad (5.38)$$

et à volume constant ($\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ dans l'équation 5.34), l'équation 5.34 devient

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{\gamma}{c_p} \dot{\omega}_T. \quad (5.39)$$

On reviendra en détails sur les équations d'évolution de la thermo-chimie des réacteurs homogènes dans la sous-section 5.4.4.1.

Afin de tester l'hypothèse selon laquelle chaque volume fluide de l'écoulement se comporte comme un réacteur homogène, on peut étudier la dynamique de la combustion dans un scatter plot où la valeur des termes du membre de droite des équations 5.34 sont représentés en fonction du terme du membre de gauche DT/Dt . Dans le cas où l'hypothèse de réacteur homogène s'avérerait parfaitement juste, on obtiendrait, à pression constante ou à volume constant, les comportements linéaires suivant :

- le terme de diffusion étant nul dans les deux cas, il est représenté par la droite $y = 0$;

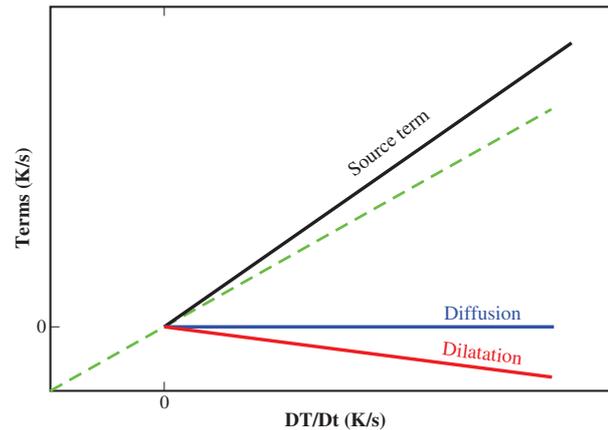


FIGURE 5.20 – Pour un réacteur homogène à pression constante, réponses des termes du membre de droite de l'équation 5.34 en fonction de DT/Dt , leur somme (*i.e.* le terme du membre de gauche). Droite pointillée verte : bissectrice du plan.

- à pression constante, on montre que $-(\gamma - 1)T\nabla \cdot \mathbf{u} = -(\gamma - 1)DT/Dt$ et donc que le terme de compression/dilatation (rendant compte ici uniquement de la dilatation par expansion thermique du volume du réacteur) de l'équation 5.34 se comporte linéairement par rapport à DT/Dt , avec une pente négative $-(\gamma - 1)$. A volume constant, $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ et ce terme coïncide donc avec la droite $y = 0$;
- à pression constante, le terme source est proportionnel à DT/Dt , avec une pente $1/c_p$. A volume constant, un comportement linéaire est obtenu, avec un coefficient directeur de $1/c_v$.

Si un écart par rapport au comportement du réacteur homogène à pression constante est observé, il se traduira par une dispersion des points autour des comportements linéaires présentés ci-dessus. La même dispersion sera obtenue à volume constant, seule les pentes du terme source et du terme de compression/dilatation seront différents du cas à pression constante. Ainsi, pour éviter la redondance des observations, on comparera, dans la suite, le comportement de l'auto-inflammation extrait des simulations directes, aux réponses du réacteur homogène à pression constante uniquement.

Le scatter plot idéal, donné par la réponse d'un réacteur homogène à pression constante, est présenté sur la figure 5.20. Cette représentation de la dynamique de l'auto-inflammation permet d'observer les écarts à la dynamique du réacteur homogène. Ceux-ci se traduisent par des dispersions plus ou moins importantes autour des comportements linéaires présentés juste avant. L'analyse qui suit n'a qu'une portée qualitative. Elle permet d'identifier les origines des biais introduits par l'hypothèse de réacteur homogène et de mettre en exergue les défis qu'une éventuelle tabulation de la chimie doit être capable de relever.

Sur les figures 5.21 et 5.22, on présente ainsi ces scatter plots pour les cas (3) et (4). Dans le cas (3), où l'auto-inflammation a lieu plus tardivement, le transport turbulent de la température a favorisé la diffusion moléculaire de la chaleur dans tout le volume de la chambre de combustion, avant l'auto-allumage, qui se produit en conséquence très localement. La contribution du terme de diffusion est donc plus importante que dans le cas (4), comme l'atteste la dispersion plus importante, tout au long de l'auto-inflammation. En outre, on constate que le terme de dilatation ne montre pas de dispersion significative

dans le cas (3), à la différence du cas (4), où d'importants écarts au comportement linéaire sont observés au moment de l'auto-inflammation. On peut attribuer cette importante dispersion aux fortes ondes des pressions générées par l'auto-allumage homogène du premier site, et qui induisent à leur passage au travers des volumes fluides une variation temporelle de la pression, et donc une perturbation autour du comportement à pression constante.

En mettant toutes ces observations en perspective avec la tabulation de la chimie, l'historique des composantes du vecteur d'entrée, et plus particulièrement celui des conditions thermodynamiques initiales, doit prendre en compte ces dispersions autour du comportement du réacteur homogène à pression ou à volume constant. Pour illustrer cette problématique, on montre sur la figure 5.23 l'évolution lagrangienne de la variable de progrès $c(\mathbf{x}(t))$ dans le premier noyau d'auto-inflammation du cas (4), le long de la trajectoire suivie par le maximum de température. Sur le même graphique, on trace les solutions obtenues en intégrant les équations du réacteur homogène à pression constante initialisées par différentes conditions ($c(\mathbf{x}(t)), T(\mathbf{x}(t))$) prises le long de cette même trajectoire. On remarque que, pour des états initiaux choisis avant que la contribution du terme source chimique ne prédomine dans le bilan, des perturbations dans la DNS, induites notamment par le terme de compression/dilatation, provoquent un écart entre la trajectoire réelle et celle du PSR. Cependant, pour des états initiaux sélectionnés à un instant très proche de l'auto-allumage, une correspondance parfaite est observée, soulignant l'importance de la prise en compte de l'historique de l'écoulement dans la modélisation.

Dans la section suivante, on étaye et complète les analyses menées jusqu'ici, en proposant une représentation alternative de l'écoulement, rendue possible par l'hypothèse des réacteurs homogènes.

5.4.4 Tests et exploitation *a posteriori* de la tabulation des réponses de PSR

5.4.4.1 Equations d'évolution de l'état thermochimique d'un réacteur homogène

Formes générales

Dans ce type de configuration, toutes les quantités physiques sont parfaitement homogènes dans l'espace, les équations de conservation 5.33, 5.34 et 5.35 devenant respectivement

$$c_v \frac{dT}{dt} = \dot{\omega}_T + \frac{P}{\rho^2} \frac{d\rho}{dt}, \quad (5.40)$$

$$c_p \frac{dT}{dt} = \dot{\omega}_T + \frac{1}{\rho} \frac{dP}{dt}, \quad (5.41)$$

et

$$\frac{dc}{dt} = \dot{\omega}_c. \quad (5.42)$$

A l'instar des flammes de prémélange stationnaires, il est possible de tabuler les réponses associées à cet archétype de combustion, à condition d'imposer une hypothèse supplémentaire de pression constante ou de volume constant sur le comportement du réacteur. Dans ce cas en effet, en effectuant le changement de variable

$$\frac{d\bullet}{dt} = \frac{d\bullet}{dc} \frac{dc}{dt} = \frac{d\bullet}{dc} \dot{\omega}_c, \quad (5.43)$$

on montre que l'état du réacteur est alors entièrement déterminé par la donnée de son avancement c et de sa température initiale T_0 , que l'on appellera par la suite température des gaz frais. Les grandeurs thermochimiques d'un réacteur à pression ou à volume constant peuvent donc être tabulées en fonction du vecteur d'entrée (c, T_0) .

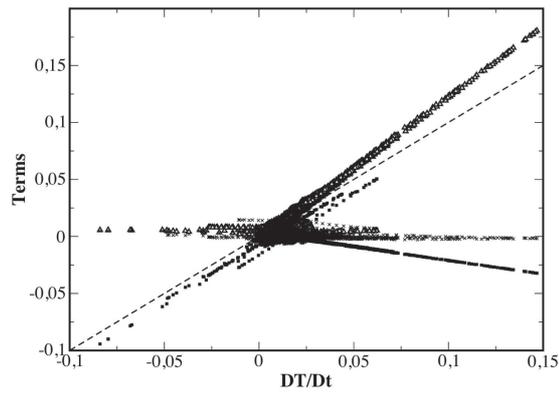
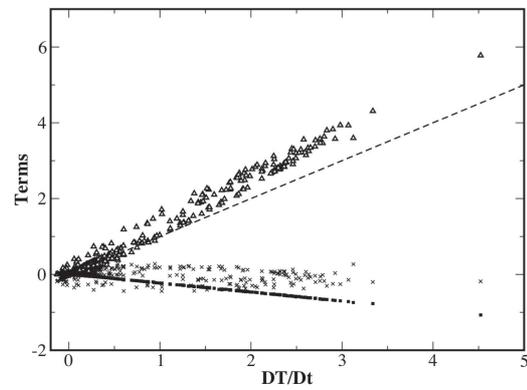
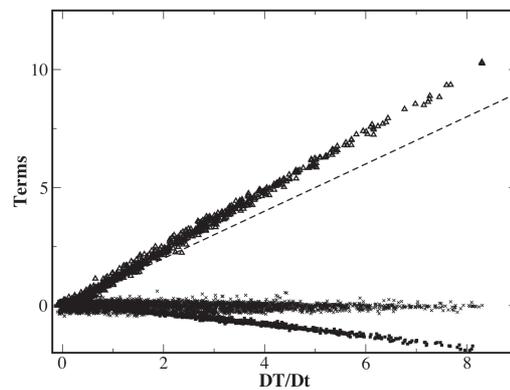
(a) $t^* = 1.1876$ (b) $t^* = 1.1934$ (c) $t^* = 1.1999$

FIGURE 5.21 – Données extraites du cas (3). Croix : terme de diffusion dans l'équation 5.34. Triangle : terme source d'énergie. Carrés : terme de compression/dilatation. Axes normalisés par $10^{-3}(t_{TDC}/T_0)$. Ligne pointillée : somme des termes ($= DT/Dt$).

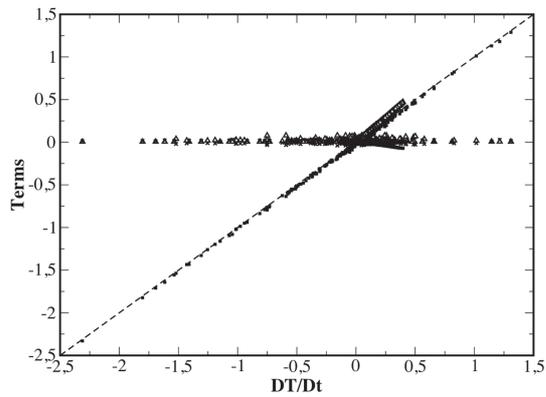
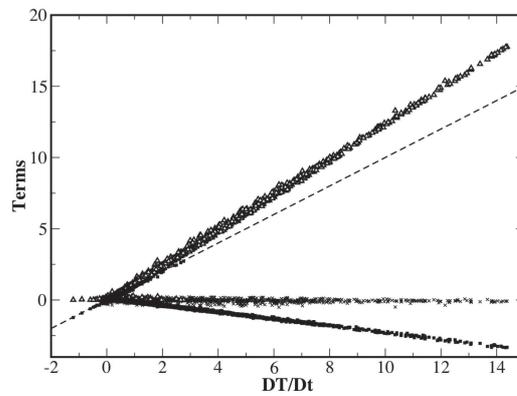
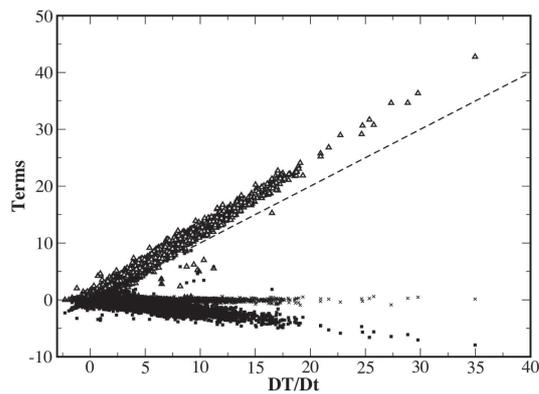
(a) $t^* = 0.970$ (b) $t^* = 0.972$ (c) $t^* = 0.973$

FIGURE 5.22 – Données extraites du cas (4). Croix : terme de diffusion dans l'équation 5.34. Triangle : terme source d'énergie. Carrés : terme de compression/dilatation. Axes normalisés par $10^{-3}(t_{DC}/T_0)$. Ligne pointillée : somme des termes ($= DT/Dt$).

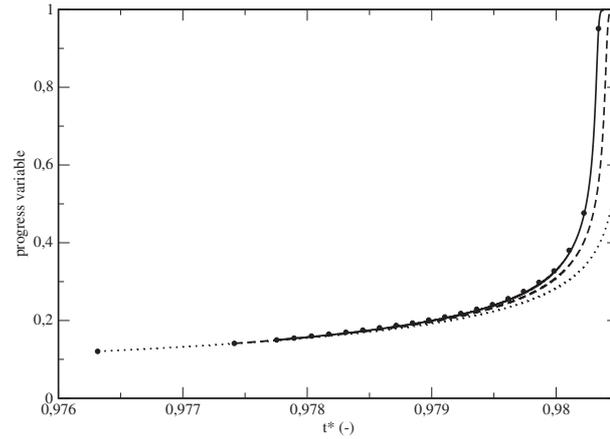


FIGURE 5.23 – Evolution temporelle de la variable d'avancement le long de la trajectoire du maximum de température. Cercles : DNS du cas (4). Points : PSR initialisé à $t^* = 0.9762$. Tirets : à $t^* = 0.9773$. Ligne pleine : à $t^* = 0.9776$.

A volume constant

L'évolution temporelle de la variable d'avancement c est décrite par

$$\frac{dc}{dt} = \dot{\omega}_c^v(c, T_0), \quad (5.44)$$

avec

$$\dot{\omega}_c^v(c, T_0) = K_p(1 - c)e^{-\frac{T_{ac}}{T^v(c, T_0)}}. \quad (5.45)$$

L'équation de conservation de l'énergie sous la forme 5.40 devient quand à elle

$$c_v \frac{dT^v(c, T_0)}{dt} = \dot{\omega}_T^v(c, T_0). \quad (5.46)$$

Pour déterminer la température des gaz frais T_0 , on utilise le changement de variable 5.43 dans l'équation 5.46 et on obtient avec la relation 5.32 que

$$\int_{T_0}^{T^v(c, T_0)} c_v(T') dT' - \Delta h_c^0 c = 0. \quad (5.47)$$

Ainsi, connaissant c qui est transportée, déterminer la température initiale T_0 d'un réacteur à volume constant revient à déterminer la solution de l'équation 5.47.

A pression constante

L'évolution temporelle de la variable d'avancement c est décrite par

$$\frac{dc}{dt} = \dot{\omega}_c^p(c, T_0), \quad (5.48)$$

avec

$$\dot{\omega}_c^p(c, T_0) = K_p(1 - c)e^{-\frac{T_{ac}}{T^p(c, T_0)}}. \quad (5.49)$$

L'équation de conservation de l'énergie sous la forme 5.41 se simplifie dans ce cas en

$$c_p \frac{dT^p(c, T_0)}{dt} = \dot{\omega}_T^p(c, T_0), \quad (5.50)$$

qui devient à son tour, après le changement de variable 5.43

$$\int_{T_0}^{T^p(c, T_0)} c_p(T') dT' - \Delta h_c^0 c = 0. \quad (5.51)$$

Pour déterminer T_0 d'un réacteur à pression constante, connaissant son avancement, il faut donc résoudre l'équation 5.51.

Cas où c_p et c_v sont constants

Enfin, dans le cas où c_p et c_v sont constants, on montre facilement que les termes sources $\dot{\omega}_c$ et donc $\dot{\omega}_T$ sont les mêmes à pression ou à volume constant.

Les égalités 5.47 et 5.51 permettent de relier la température locale de la DNS à la température locale des gaz frais T_0 , en fonction du c local. L'équation 5.47, obtenue à volume constant, devient

$$T_0 = T - \gamma T_{ref} \frac{\alpha}{1 - \alpha} c \quad (5.52)$$

et son pendant à pression constant 5.51 se simplifie en

$$T_0 = T - T_{ref} \frac{\alpha}{1 - \alpha} c. \quad (5.53)$$

Les termes sources de la variable d'avancement à pression constante et à volume constant sont égaux quelque soit c si $T^v(c, T_0) = T^p(c, T_0)$. En d'autres termes, à c_v et c_p constants, les tables à pression ou à volume constant sont équivalentes à un changement de variable près :

$$\dot{\omega}_c^p \left(c, T_0 + T_{ref} \frac{\alpha}{1 - \alpha} c \right) = \dot{\omega}_c^v \left(c, T_0 + \gamma T_{ref} \frac{\alpha}{1 - \alpha} c \right). \quad (5.54)$$

5.4.4.2 Validité du modèle des réacteurs homogènes

Pour mener une étude a posteriori sur le comportement de l'auto-allumage par l'intermédiaire de la réponse de réacteurs, la validité du modèle de réacteurs homogènes doit être montrée. L'hypothèse de base de ce modèle consiste à assimiler chaque maille du domaine de calcul à un réacteur homogène dont l'état est entièrement déterminé par la connaissance de la variable d'avancement c et de la température des gaz frais T_0 . Le terme source dans l'équation de transport de l'énergie et de c servant à avancer leur intégration temporelle peuvent ainsi être tabulés en fonction de c et T_0 qui sont donc supposées connues. Dans les DNS présentées ci-dessus où la chimie implantée est décrite par une loi de type Arrhénius à une étape, c est transportée et la température T est déterminée en inversant l'énergie totale non-chimique. En utilisant 5.52, on peut donc déduire T_0 et ainsi comparer a posteriori le terme source de c $\dot{\omega}_c(\mathbf{x}, t)$ extrait de la DNS à celui d'un réacteur homogène extrait des tables à volume constant $\dot{\omega}_c^v(c(\mathbf{x}, t), T_0(\mathbf{x}, t))$ noté dans la suite $\dot{\omega}_c^{tab}$ ⁷. On peut également étudier l'impact de la valeur de T_0 sur la réponse donnée par les tables en confrontant, par exemple, la réponse extraite des tables pour un T_0 local $T_0(\mathbf{x}, t)$ ou moyenné sur tout le domaine fluide $\langle T_0(\mathbf{x}, t) \rangle$.

Les résultats de ces comparaisons sont consignés dans la figure 5.24 qui regroupe, pour les deux cas traités, les scatter plots $\dot{\omega}_c^{tab}$ v.s. $\dot{\omega}_c^{DNS}$ à trois instants représentatifs : mélange quasi-inerte ($t_{cas 1}^* = 0.971$

7. On rappelle que les tables à pression ou à volume constant sont équivalente à un changement de variable près pour c_p et c_v constants ; il est donc inutile de tester la validité des deux type de réacteurs dans la modélisation des processus chimiques

et $t_{\text{cas } 2}^* = 1.339$), initiation/auto-inflammation ($t_{\text{cas } 1}^* = 0.983$ et $t_{\text{cas } 2}^* = 1.371$) et combustion établie ($t_{\text{cas } 1}^* = 0.987$ et $t_{\text{cas } 2}^* = 1.375$).

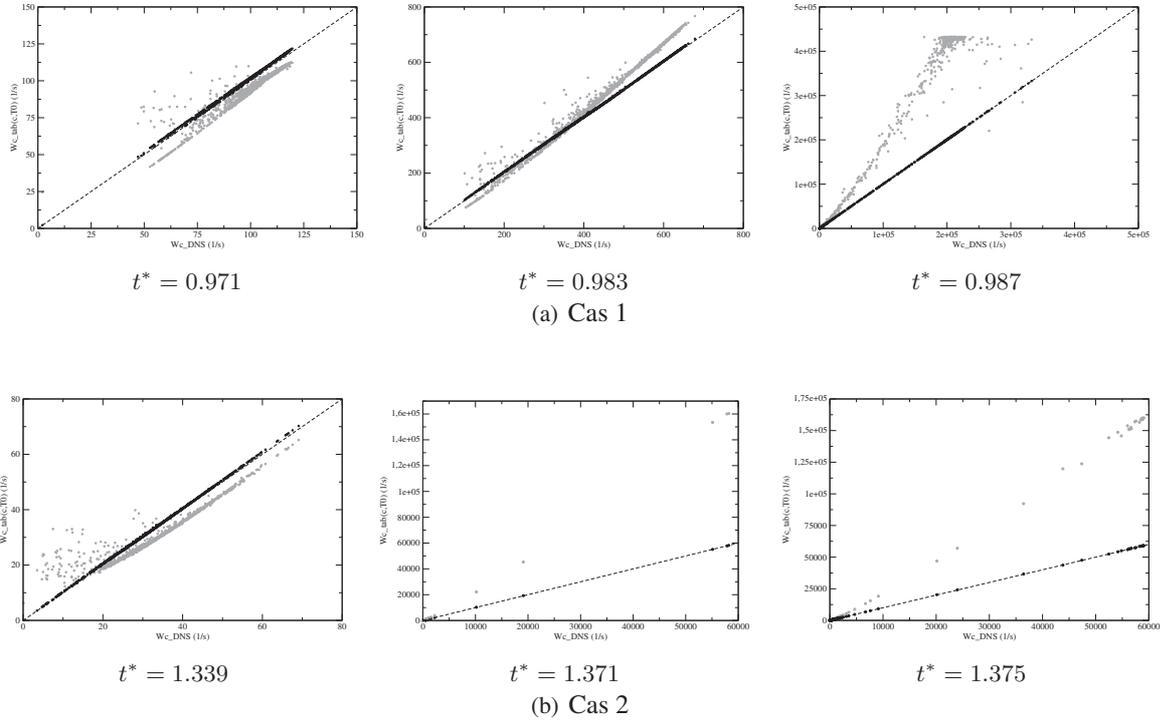


FIGURE 5.24 – scatter plots du terme source tabulé en fonction de (c, T_0) vs le terme source directement extrait de la DNS. Noir : T_0 local calculé à partir de 5.52 ; gris : T_0 calculé à partir de 5.52 et moyenné sur tout le domaine.

Deux observations principales ressortent directement de l'analyse de la figure 5.24. D'une part, l'accord entre le terme source extrait des DNS et celui extrait des tables d'auto-inflammation avec c et $T_0 = T_0(\mathbf{x}, t)$ obtenus à partir des DNS (en noir) est quasi-parfait, à tout instant du processus d'auto-inflammation. D'autre part, en prenant $T_0 = \langle T_0(\mathbf{x}, t) \rangle$ comme entrée dans la table (en gris), on observe que la sensibilité de la réponse des tables à la valeur de T_0 est forte, comme l'atteste la forte dispersion obtenue dans les scatter plots du cas 1 ou les écarts à la droite $y = x$ observés dans le cas 2. En d'autres termes, une valeur unique de T_0 ne peut donc pas être considérée comme représentative dans la description locale des processus chimiques de l'auto-inflammation, même en première approximation.

L'analyse des scatter plots pour $T_0 = \langle T_0(\mathbf{x}, t) \rangle$ (en gris et à droite) permet également de mettre en évidence la signature des deux types d'auto-allumage précédemment illustrés. En effet, la saturation observée à $t^* = 0.987$ pour les valeurs maximales du terme source tabulé dans le cas 1 correspond à une valeur unique de la variable d'avancement ($c \approx 0.8$), coïncidant avec la valeur de c pour laquelle le terme source est maximal à $\langle T_0(\mathbf{x}, t) \rangle$. De nombreux points de l'écoulement sont donc en train de s'auto-inflammer simultanément, condition nécessaire pour caractériser un régime d'auto-allumage homogène. Cette propriété n'est pas observée dans le cas 2 à $t^* = 1.371$ pour lequel on avait identifié une auto-inflammation de type localisé.

Le modèle de réacteur homogène paramétré par des valeurs locales de c et T_0 , où T_0 est déterminé en chaque maille à partir de l'équation 5.52 est donc particulièrement adapté à la description, à posteriori en tous cas, de la chimie de l'auto-inflammation et les tables peuvent ainsi être utilisées comme outils de postraitement de champs DNS. Cela permettra, on le verra dans la suite, de contourner certaines difficultés relatives à l'analyse de l'auto-inflammation.

5.4.4.3 Remarques sur T_0

A $Le = 1$, on a $D_c = \lambda/\rho c_p = D$ et en utilisant l'égalité 5.52, l'équation de transport de la température des gaz frais pour un réacteur à pression constante s'écrit

$$\frac{DT_0}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho D \nabla T_0) + \frac{1}{\rho c_p} \frac{DP}{Dt}, \quad (5.55)$$

ou pour un réacteur à volume constant

$$\frac{DT_0}{Dt} = \frac{1}{\rho} \nabla \cdot (\rho D \nabla T_0) - (\gamma - 1) T \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (5.56)$$

T_0 est un scalaire passif qui voit les pertes thermiques ainsi que les effets de compression/dilatation. c ne subissant que les pertes thermiques par diffusion aux parois, c'est donc par l'intermédiaire de T_0 que les variations locales de volume ou de pression impactent l'histoire du réacteur à volume ou à pression constante. La contribution du dégagement de chaleur chimique est ressentie par T_0 au travers :

- du terme de convection inclus dans la dérivée particulaire, la dilatation induite par le dégagement de chaleur modifiant la distribution de la masse volumique et en conséquence, le champ de vitesse. Cette modification de la vitesse convective n'a pas d'effet sur la variation temporelle de la température du réacteur que l'on suit dans son mouvement ;
- de l'augmentation de pression induite par le dégagement de chaleur dans un volume fermé, via le deuxième terme du membre de droite. La contribution de ce terme dans l'évolution de la température des gaz frais T_0 du réacteur est nécessairement positive, puisque $DP/Dt > 0$, d'abord à cause de la compression volumétrique, puis à cause du dégagement de chaleur chimique dans un volume fermé, lorsque la chimie de l'auto-inflammation devient vive.

Le terme de diffusion a pour effet de diminuer T_0 , le flux de chaleur aux parois de la chambre de combustion étant négatif. En conclusion, si l'on observe une diminution globale de T_0 dans le domaine, c'est nécessairement que l'intégralité des volumes fluides ont subi l'effet des pertes thermiques des parois, via la diffusion laminaire favorisée par les phénomènes de transports turbulents.

En particulier, dans le cas limite où T_0 est parfaitement homogène dans l'espace et ne subit pas les pertes thermiques aux parois, c'est-à-dire au sein du coeur adiabatique, les équations 5.55 et 5.56 deviennent respectivement

$$\frac{DT_0}{Dt} = \frac{1}{\rho c_p} \frac{DP}{Dt}, \quad (5.57)$$

et

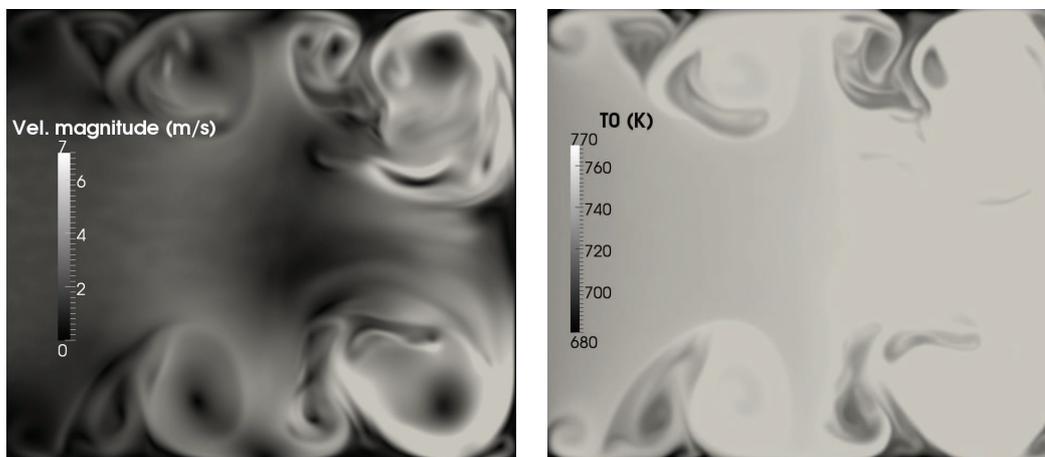
$$\frac{DT_0}{Dt} = -(\gamma - 1) T \nabla \cdot \mathbf{u}, \quad (5.58)$$

et correspondent à la loi d'évolution de la température adiabatique de compression tant que la chimie est peu active et que le fluide peut être considéré comme inerte⁸. Au moment où le point mort haut est

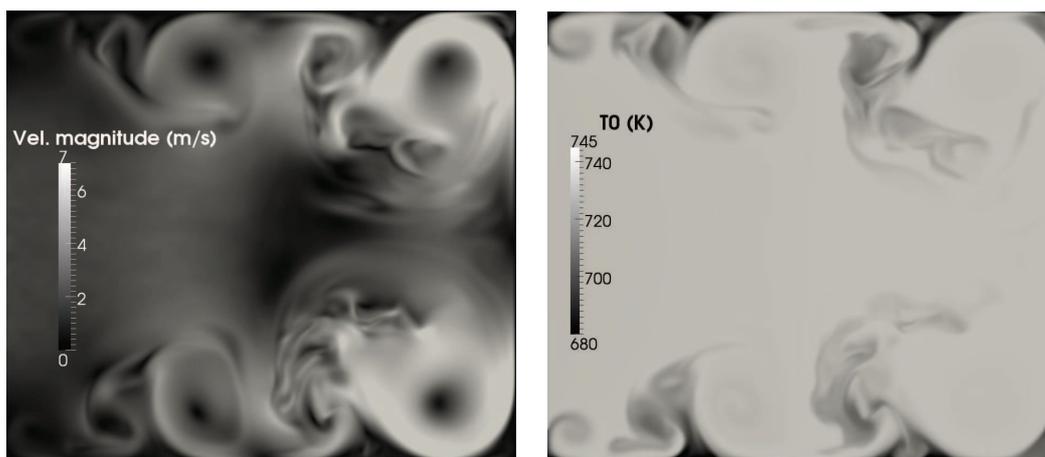
8. Lorsque la chimie de l'auto-inflammation est vive, sa contribution via les membres de droite des équations 5.57 et 5.58 devient significative.

atteint, ces termes sont nuls dans le coeur adiabatique : la température adiabatique de compression et le T_0 local doivent y être constants et égaux, jusqu'à l'auto-inflammation.

Avant que la chimie de d'auto-inflammation ne soit vive dans le cas 1, c'est-à-dire pour $t^* \in [0, 0.98]$, l'aérodynamique dans la chambre de combustion du cas 1 est sensiblement identique à celle du cas 2. En effet, les conditions limites d'admission étant les mêmes et la chimie étant faible, la topologie des champs de vitesses et de T_0 sont équivalente, comme l'atteste la figure 5.25 représentant deux coupes longitudinales par cas, prises au même instant ($t^* = 0.962$) : l'une de la norme de la vitesse et l'autre, du niveau de T_0 . On note simplement une différence sur les niveaux de T_0 , plus élevés dans le cas 1 ($T_{0_{max}}^* \approx 770 \text{ K}$) que dans le cas 2 ($T_{0_{max}}^* \approx 745 \text{ K}$). Même s'il est encore faible, le dégagement de chaleur dans le cas 1 est supérieur à celui du cas 2, la réaction étant plus avancée dans le cas 1 que dans le cas 2. En conséquence, au même instant, $DP/Dt_{cas1} > DP/Dt_{cas2}$ et donc $T_{0_{cas1}}(\mathbf{x}, t) > T_{0_{cas2}}(\mathbf{x}, t)$.



(a) Cas 1



(b) Cas 2

FIGURE 5.25 – $t^* = 0.962$ - A gauche, coupe longitudinale de la norme de la vitesse (m/s) ; à droite, coupe longitudinale de T_0 (K).

5.4.4.4 Détermination de l'existence du coeur adiabatique

L'existence d'un coeur adiabatique est un point important dans l'analyse de l'auto-inflammation. Dans les laboratoires étudiant la cinétique chimique, elle est condition nécessaire à la validité d'une MCR classique : elle permet notamment de s'assurer que le délai d'auto-inflammation mesuré pourra être utilisé comme référence pour valider un schéma cinétique⁹. Ainsi, dans [52], Hu et Keck soulignent le fait que la température du coeur adiabatique contrôle le processus d'auto-inflammation et qu'elle doit, par conséquent, être utilisée pour corrélérer l'expérience à la théorie. Pour les motoristes, l'existence d'un coeur adiabatique dans le cylindre implique la possibilité d'un auto-allumage en masse d'un volume important du domaine, avec risque de destruction à cause d'un dégagement de chaleur global trop soudain, où à cause de la génération d'ondes de pression de forte amplitude, selon le mécanisme de couplage constructif entre l'onde d'auto-inflammation et les ondes acoustiques proposé par Zel'dovich.

Il est possible d'avoir la preuve de l'existence ou non d'un coeur adiabatique en regardant l'état des volumes fluides dans le plan (c, T_0) . D'après les remarques faites sur T_0 dans 5.4.4.4, avant $t^* = 0.98$, on peut donc étudier de manière équivalente les champs de T_0 du cas 1 et du cas 2, à une différence de niveau près. On ne fait apparaître ici que la répartition des états (c, T_0) du cas 2. Dans ce dernier, l'historique est plus riche dans la mesure où l'auto-inflammation a lieu plus tardivement, à un instant où la turbulence est en décroissance et où le mélange laminaire et turbulent a affecté significativement le coeur adiabatique. Les résultats sont présentés à quatre instants représentatifs dans la figure 5.26.

Les croix grises correspondent aux états (c, T_0) des volumes fluides de la chambre de combustion peu avant le point-mort-haut ($t^* = 0.962$) et juste avant l'auto-inflammation dans le cas 1. La ligne pointillée grise horizontale montre la température de compression adiabatique T_{ad}^* au même instant. On constate qu'il existe une portion de la chambre de combustion où $T_0 = T_{ad}$, en d'autres termes où un coeur adiabatique existe. Il est évident que la présence de ce coeur favorise l'auto-allumage en régime homogène que l'on observe dans le cas 1. La même constatation peut être faite à $t^* = 1$, la seule différence avec l'instant précédant venant du fait que $T_{ad}(t^* = 1) > T_{ad}(t^* = 0.962)$, à cause de la compression volumétrique continuant d'avoir lieu. Après le point mort haut cependant, T_{ad} ne doit plus changer, le volume de la chambre de combustion étant fixé définitivement. A $t^* = 1.028$, les niveaux de T_0 diminuent globalement dans la chambre de combustion et les volumes fluides passent tous dans un état où $T_0 < T_{ad}$. Cette observation illustre le fait que la structure du coeur adiabatique commence à être affectée par les pertes thermiques. Cet impact est évident à $t^* = 1.355$ (triangles gris).

De plus, pour $t^* > 1$, on observe que la valeur maximale de T_0 pour un c donné diminue quand c augmente. Cette tendance peut être attribuée à un effet local d'initiation à pression constante : dans les zones en train de s'initier, pour maintenir sa pression, le volume du réacteur augmente par dilatation, ce qui a pour effet de diminuer localement la valeur de dP/dt qui reste positive malgré tout. En conséquence, T_0 est plus faible dans les régions où c est plus élevé qu'ailleurs. Cet effet est d'autant plus fort que l'auto-allumage est local, c'est-à-dire que le volume des zones en train de s'auto-allumer est faible devant celles encore en phase d'initiation. Pour comprendre ce mécanisme, il est utile d'utiliser l'équation de l'énergie

9. L'objectif de la MCR de L'Institut Jean Le Rond d'Alembert est d'étudier l'impact de la turbulence sur l'initiation et le développement de l'auto-inflammation ; elle n'est donc pas conçue uniquement dans le but de maintenir un coeur adiabatique pour une étude de la cinétique purement 0D.

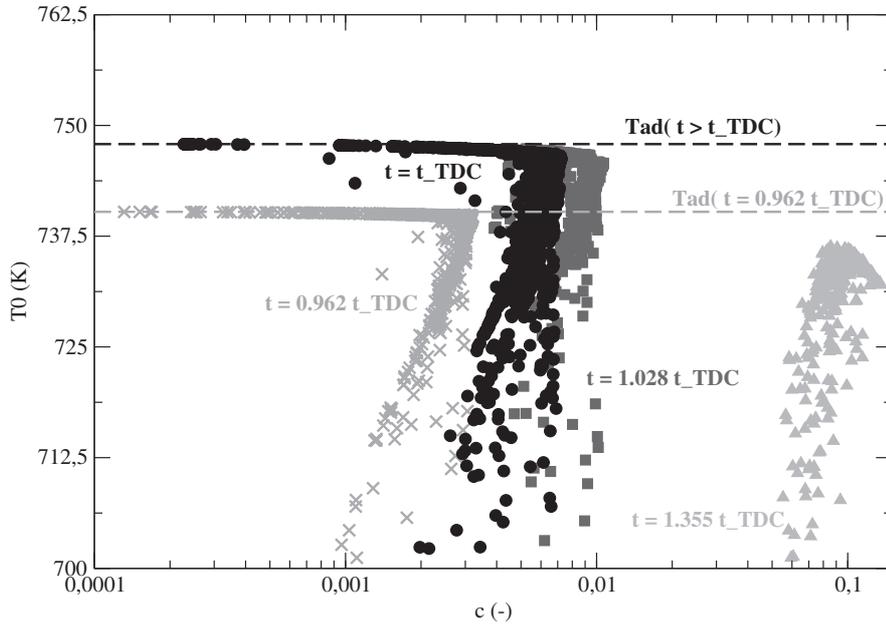


FIGURE 5.26 – Cas 2 - scatter plots T_0 v.s. c . Croix grises : $t^* = 0.962$; cercles noirs : $t^* = 1$; carrés gris : $t^* = 1.028$; triangles gris : $t^* = 1.355$

sous la forme 5.40 en remplaçant les dérivées droites par des dérivées particulières (suivi lagrangien de réacteurs homogènes) de façon à pouvoir la réécrire

$$\frac{DT}{Dt} = \frac{1}{c_v} \dot{\omega}_T - (\gamma - 1) T \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (5.59)$$

On suppose que le point mort haut est atteint, c'est-à-dire que $\int_V (\nabla \cdot \mathbf{u}) dV = 0$. Deux cas limites peuvent alors être envisagés :

- l'auto-allumage en masse de toute la chambre de combustion : dans ce cas, le champ $\nabla \cdot \mathbf{u}$ est nul partout dans le domaine et l'équation 5.59 devient alors l'équation d'évolution de la température d'un réacteur à volume constant sous forme lagrangienne ;
- l'auto-allumage en un point de la chambre de combustion : dans le cas limite où le volume du noyau est infiniment petit par rapport au volume de la chambre de combustion, son expansion thermique, mesurée par $\nabla \cdot \mathbf{u}$, est libre. C'est celle nécessaire à maintenir la pression constante dans le réacteur. Par la loi des gaz parfait avec c_p et c_v constants, on montre que dans ce cas là, $DT/Dt = T \nabla \cdot \mathbf{u}$ et on retrouve naturellement l'équation d'évolution de la température dans un réacteur homogène à pression constante.

Le modèle de réacteur utilisé pour tabuler la chimie doit être capable de prendre en compte cette distinction entre la combustion à volume constant ou pression constante. En effet, il a été montré dans [30] que pour des cinétiques complexes, les chemins réactionnels empruntés pour des auto-inflamations dans ces deux types de configurations étaient bien différents. Bien qu'ici, la cinétique soit très simplifiée, il est tout de même possible de déterminer le type de combustion dans lequel l'auto-inflammation se

développe : c'est l'objet de la partie 5.4.4.6.

5.4.4.5 Impact de l'instabilité toroïdale de Kelvin-Helmholtz sur le régime d'auto-inflammation et prédiction du modèle de Zel'dovich

De par leur nature axisymétrique, les tores de Kelvin-Helmholtz et leur impact sur l'initiation et le développement de l'auto-inflammation peuvent être étudiés en effectuant des statistiques radiales sur la chambre de combustion, c'est-à-dire en ramenant les champs physiques à des moyennes sur un plan (x, r) , où x est la direction longitudinale et r , la direction radiale. Ces structures sont présentes au moment de l'auto-inflammation dans le cas 1, à $t^* = 0.976$, mais elles se sont dissipées dans le cas 2, à $t^* = 1.134$. Dans la suite de ce paragraphe, on montre comment cette différence dans l'écoulement affecte le régime d'auto-allumage.

Dans la table 5.3, à $t^* = 0.962$ (images de gauche), les structures de Kelvin-Helmholtz, caractérisées par une chute locale de pression, sont clairement visibles et leur impact sur le champ de T_0 et de c est bien marqué : elles isolent des zones de l'écoulement piégées dans leur coeur, ce qui a pour effet de maintenir des zones où T_0 et c sont élevés si le fluide piégé provenait du coeur adiabatique, au centre de la chambre de combustion, ou au contraire, des zones où c et T_0 sont plus faibles, si la portion de fluide isolée provenait des parois. Après le point mort haut, à $t^* = 1.028$ (images de droite sur la table 5.3), l'instabilité primaire n'est plus entretenue et les rouleaux se déstabilisent. De manière concomitante, l'effet d'isolation n'est presque plus perceptible très peu de temps après le point mort haut et le fluide du coeur adiabatique se mélange avec le fluide froid arraché aux parois.

Les images de la figure 5.27 confirment cette observation. Elles représentent l'histogramme du pourcentage du volume de la chambre de combustion pour les différentes classes de c à gauche, et de T_0 à droite, à $t^* = 0.962$ en traits pleins gris, à $t^* = 1$ en traits pleins noirs et à $t^* = 1.028$ en traits pointillés gris. L'impact de ces rouleaux, plus évident sur T_0 , se manifeste par la présence de pics de volume qui s'étalent en même temps que les structures se déstabilisent après l'instant du point mort haut.

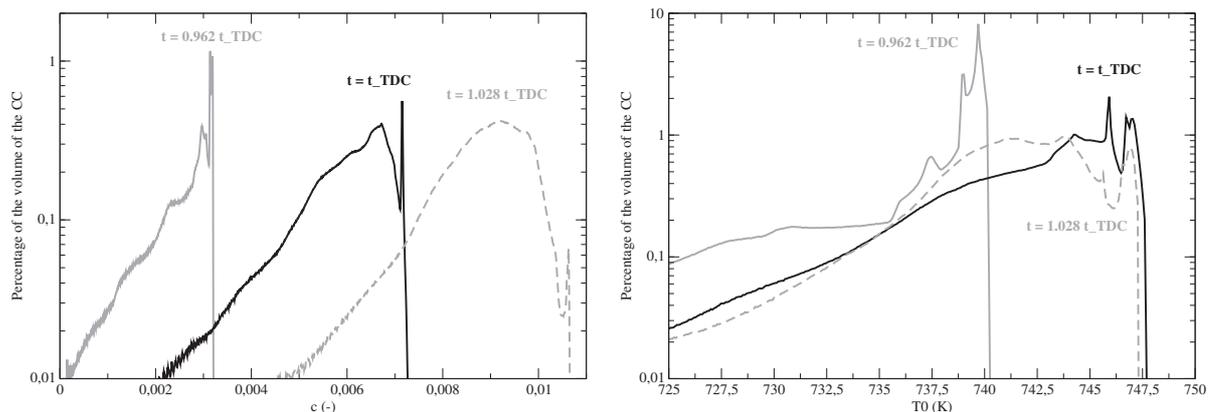


FIGURE 5.27 – Cas 2 - Histogrammes du pourcentage du volume de la CC, à gauche pour les classes de c , et à droite, pour les classes de T_0 . Trait plein gris : $t^* = 0.962$; trait plein noir : $t^* = 1$; trait pointillé gris : $t^* = 1.028$.

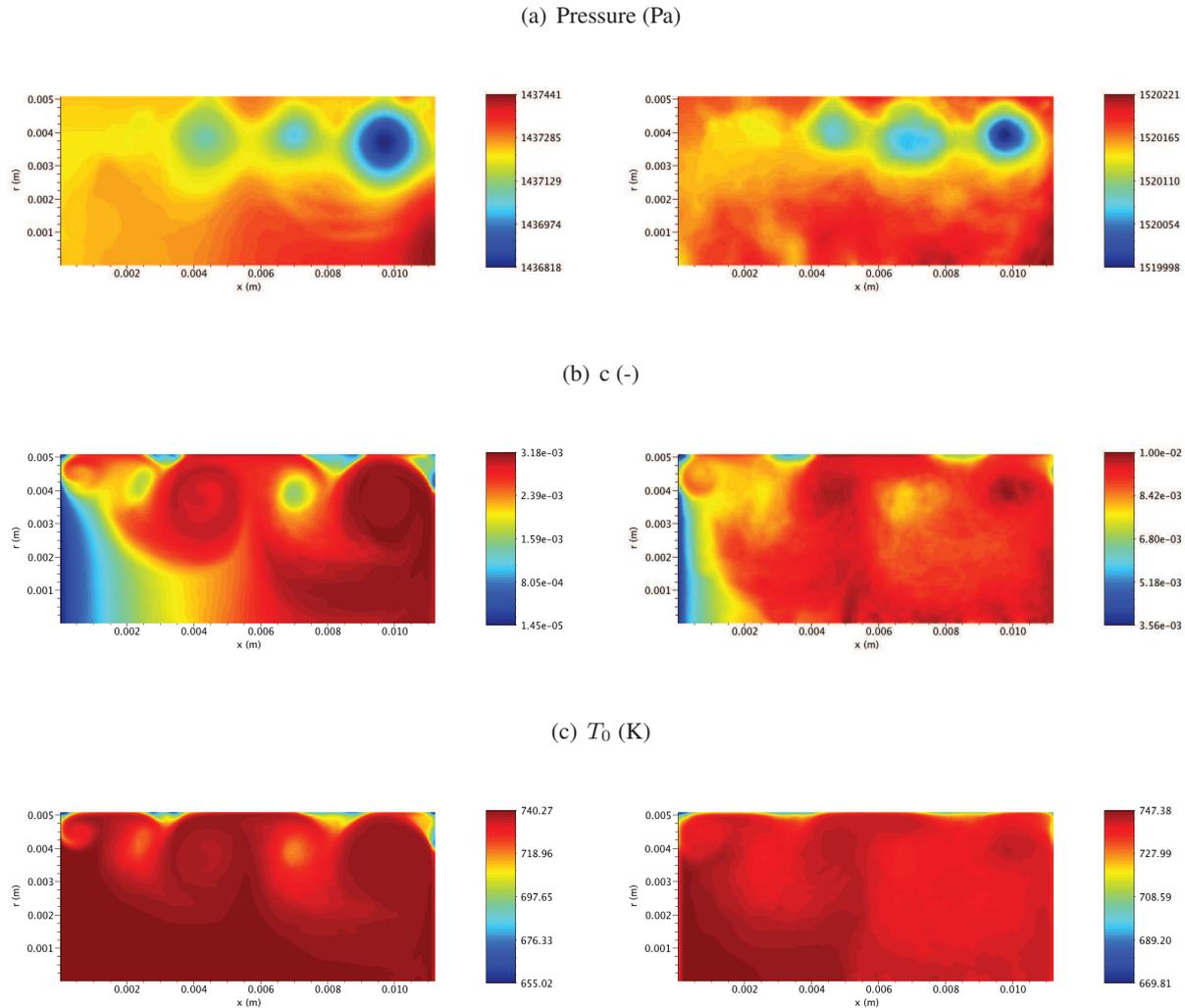


TABLE 5.3 – Cas 2 - Champs de moyennes radiales présentés dans le plan (x, r) . A gauche : $t^* = 0.962$; à droite : $t^* = 1.028$

Ces rouleaux cohérents de Kelvin-Helmholtz jouent un rôle décisif dans la sélection du régime d'auto-inflammation, homogène ou localisé. Dans la suite, leur impact est expliqué dans le cadre canonique proposé par Zeld'ovich [133]. Selon ce modèle, les phénomènes de diffusion sont supposés négligeables, les échelle spatiales des fluctuations de composition et de température étant considérées comme suffisamment faibles. La tabulation des réponses thermochimiques de réacteurs homogènes apparaît donc comme un outil d'analyse complémentaire tout indiqué.

En effet, une limite de l'approche de Zel'dovich réside dans le fait que la détermination de la vitesse de l'onde d'auto-inflammation spontanée nécessite la connaissance du champ de délai d'auto-inflammation, ce qui est très difficile en pratique. Dans une première tentative pour contourner ce problème, on a identifié cette vitesse à celle d'une iso-surface de température comparée à la vitesse du son locale afin d'illustrer le couplage entre la chimie de l'auto-inflammation et l'acoustique pouvant mener à la génération d'une onde de détonation. Ici, dans une approche de type chimie tabulée, on peut tirer

profit de l'analogie entre le comportement de la thermochimie dans la maille et celui d'un réacteur homogène, dont l'évolution n'est déterminée que par la donnée du vecteur d'entrée (c, T_0) . Le délai d'auto-inflammation τ_{ig} est défini comme l'instant où $\dot{\omega}_c$ est maximal, on peut le calculer pour un T_0 donné et tabuler les résultats (c.f. figure 5.28). En utilisant cette table, on est donc en mesure de déterminer le champ de $\tau_{ig}(t, \mathbf{x}) = \tau_{ig}(T_0(t, \mathbf{x}))$.

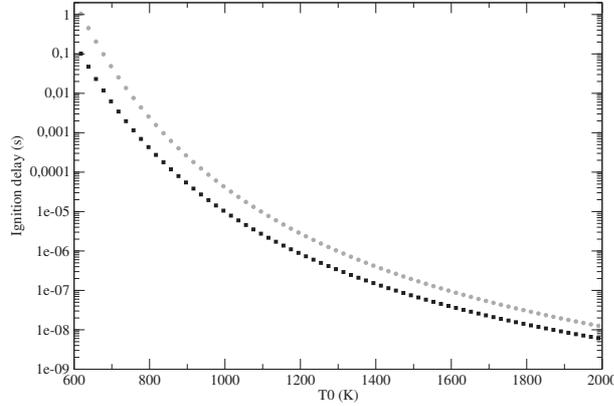


FIGURE 5.28 – τ_{ig} en fonction de T_0 . Noir : cas 1, $T_{ac} = 16500K$; gris : cas 2, $T_{ac} = 18000K$

De plus, le temps attaché à un réacteur $t^{reac}(c, T_0)$ peut également être extrait des tables. Connaissant τ_{ig} et t^{reac} , on peut déterminer en chaque maille le temps δt_{ig} restant avant l'auto-inflammation

$$\delta t_{ig}(c, T_0) = \tau_{ig}^{reac}(T_0) - t^{reac}(c, T_0). \quad (5.60)$$

La vitesse de propagation de l'onde d'auto-inflammation spontanée est calculée à partir de 5.60 comme

$$u_{sp} = \frac{1}{|\nabla \delta t_{ig}(c, T_0)|}, \quad (5.61)$$

et son champ peut donc être déterminé. D'après les travaux de Zel'dovich, si $u_{sp} \approx a$, où $a = \sqrt{\gamma r T}$ est la vitesse du son, un couplage constructif entre la chimie de l'auto-inflammation et l'acoustique se produit et si ce phénomène de résonance se maintient sur une extension spatiale suffisamment grande (ce qui est heureusement impossible aux échelles de la MCR), une onde de détonation est produite.

Sur la figure 5.29, des coupes transversales des champs de u_{sp} et a (m/s) sont extraites de la DNS du cas 1 et du cas 2, juste avant l'instant de leurs auto-inflammations respectives. Dans le cas 1 (en haut), à $t_{cas1}^* = 0.983$, en bas à droite des deux coupes, on constate la présence d'une portion conséquente du plan où u_{sp} (à gauche) est du même ordre de grandeur que la valeur locale de la vitesse du son (à droite). Dans le cas 2 (en bas), les niveaux de u_{sp} sont plus faibles que la vitesse du son. La figure 5.30 représente un histogramme de la répartition en pourcents du volume de la chambre de combustion pour les classes de u_{sp} . Les tendances observées dans la figure 5.30 confirment les observations précédentes : dans le cas 1 (en noir), une proportion non négligeable du volume de la chambre de combustion est dans un état thermochimique tel que u_{sp} est proche de la vitesse du son ; cette propriété n'est pas vérifiée dans le cas 2 (en gris).

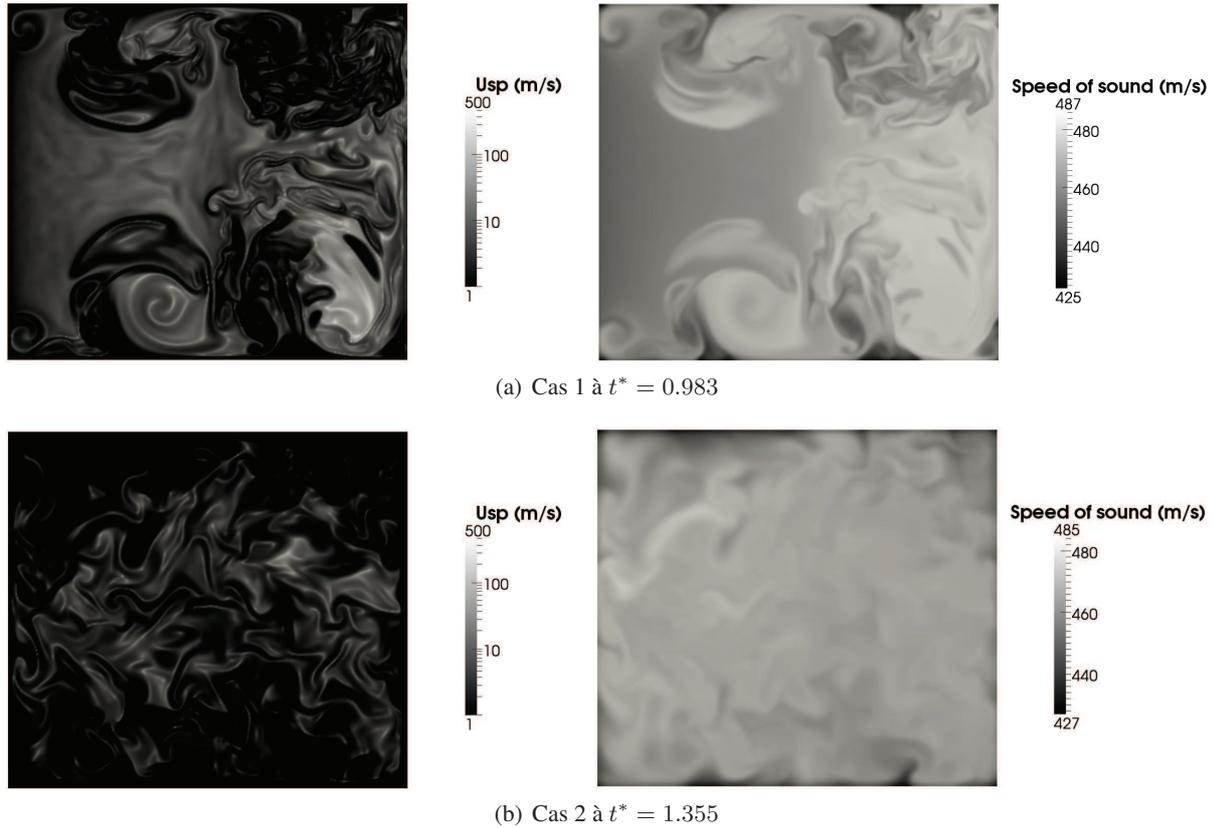


FIGURE 5.29 – Coupes longitudinales extraites de la DNS des cas 1 et 2, juste avant l'auto-inflammation. A gauche, en échelle logarithmique, niveaux de u_{sp} (m/s). A droite, niveaux de la vitesse du son (m/s).

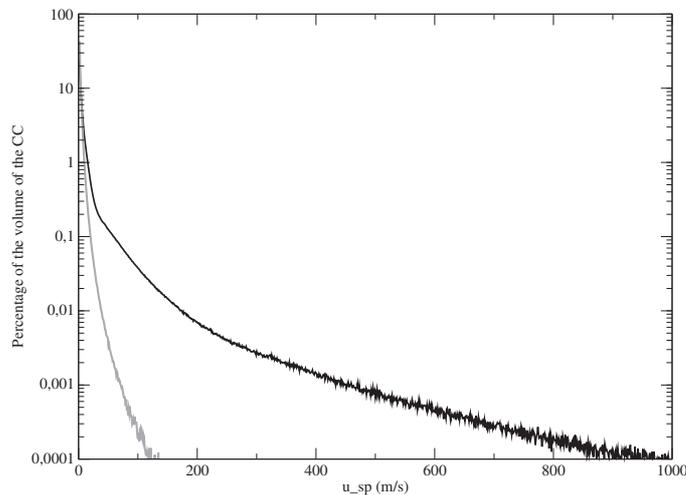


FIGURE 5.30 – Histogramme du pourcentage du volume de la CC pour les classes de u_{sp} (m/s) juste avant l'auto-inflammation dans les deux cas. Noir : cas 1 à $t_{cas1}^* = 0.983$. Gris : cas 2 à $t_{cas2}^* = 1.355$.

On illustre sur la figure 5.31 les régimes d'auto-inflammation homogène dans le cas 1 (coupes transversales en haut), et localisé dans le cas 2 (en bas). A gauche sont représentés les niveaux du terme source

de c et à droite, ceux de pression. En homogène, la chimie rapide de l'auto-allumage s'active au même instant sur de larges zones de l'écoulement : $\dot{\omega}_c$ est donc élevé sur une portion connexe de l'écoulement. Le champ de pression s'y trouve fortement affecté avec des augmentations locales de pression d'environ 10%. En outre, il existe également des zones de l'écoulement où la combustion est déflagrative, comme le prouve la présence de fronts de flammes qui ne modifient pas significativement le champ de pression. Dans le cas d'un auto-allumage localisé, illustré par les deux images en bas de la figure 5.31, le régime de propagation de la combustion reste déflagratif avec un champ de pression modifié uniquement par l'expansion subsonique des noyaux.

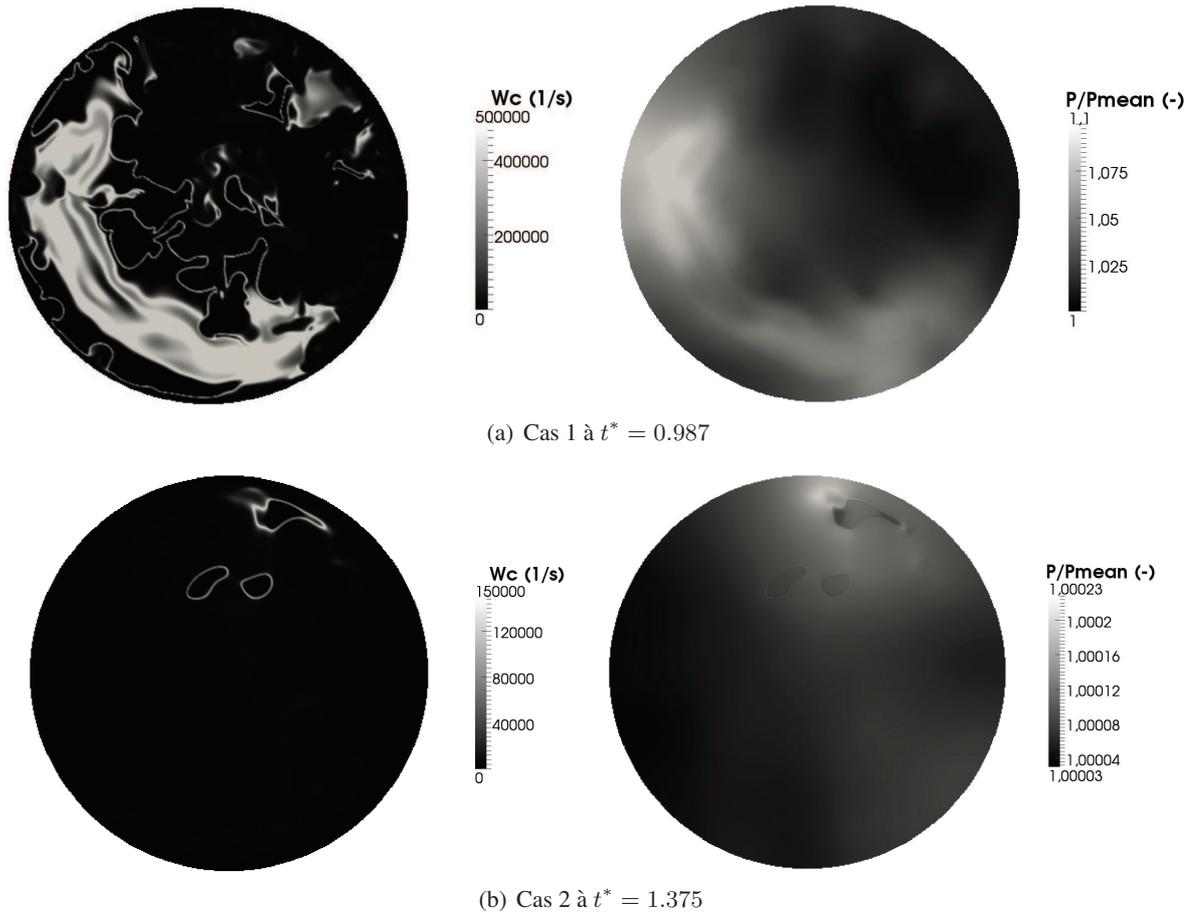


FIGURE 5.31 – Coupes transversales des champs de $\dot{\omega}_c$ à gauche et des champs de pression adimensionnée par la pression moyenne à droite pendant l'auto-allumage. (a) : $x = 0.95 \text{ cm}$. (b) : $x = 0.15 \text{ cm}$

Sur la figure 5.32, extraite de la DNS du cas 1 à l'instant $t^* = 0.983$, juste avant l'auto-inflammation, est représentée l'iso-surface $u_{sp} = 485 \text{ m/s}$ calculée via l'équation 5.61, colorée par la valeur locale de la vitesse du son. Dans cette zone, située au coeur d'un tourbillon de Kelvin-Helmholtz, la condition $u_{sp} \approx a$ est vérifiée. D'après l'analyse de Zel'dovich, cette auto-inflammation homogène dans une structure cohérente est caractérisée par la génération de fortes ondes de pression. Sur la figure 5.33, on extrait de la DNS du cas 1 le champ associé à la moyenne radiale de la pression au moment de l'auto-allumage

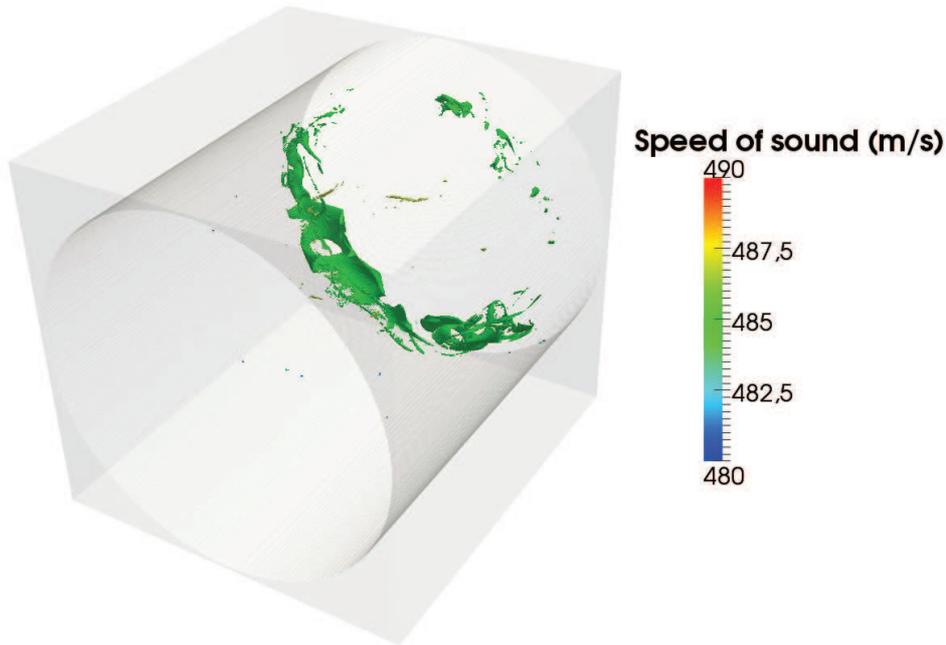


FIGURE 5.32 – Cas 1 - $t^* = 0.983$, juste avant l'auto-inflammation. Iso-surface $u_{sp} = 485$ m/s coloré par la vitesse du son (m/s).

pendant l'auto-inflammation à $t^* = 0.983$; il met en évidence la très forte corrélation entre la localisation de la source de ces ondes et celle d'un rouleau de Kelvin-Helmholtz.

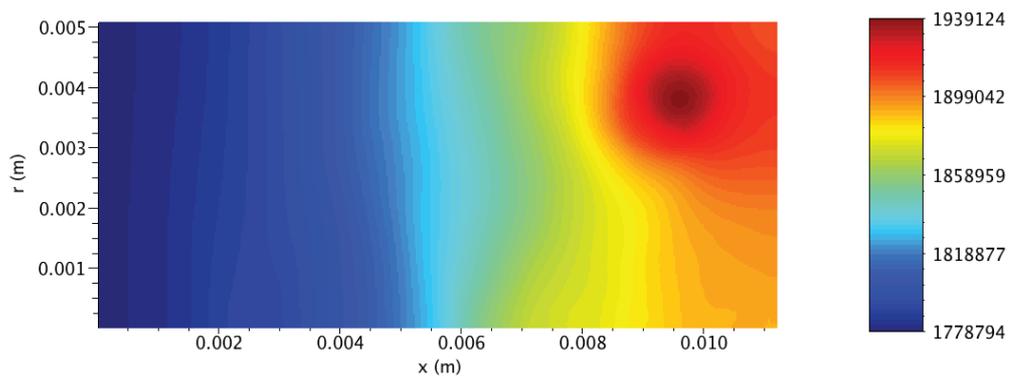


FIGURE 5.33 – Cas 1 - $t^* = 0.987$, pendant l'auto-inflammation. Champ de la moyenne radiale de la pression.

Du point de vue du motoriste, il est donc intéressant de comprendre par quel mécanisme ces zones favorables au développement de fortes ondes de pression peuvent être formées, ce qui revient à comprendre

les phénomènes de mélange laminaire et turbulents. On fait tout d'abord apparaître la dépendance de τ_{ig} au vecteur d'entrée (c, T_0) en écrivant que

$$\nabla \delta t_{ig}(c, T_0) = \left. \frac{\partial \delta t_{ig}}{\partial c} \right)_{T_0} \nabla c + \left. \frac{\partial \delta t_{ig}}{\partial T_0} \right)_{c} \nabla T_0. \quad (5.62)$$

Les quantités $\left. \frac{\partial \delta t_{ig}}{\partial c} \right)_{T_0}$ et $\left. \frac{\partial \delta t_{ig}}{\partial T_0} \right)_{c}$ sont des propriétés de la cinétique chimique du mélange gazeux réactif, alors que la topologie de ∇T_0 est conditionnée par les phénomènes de transport turbulents, particulièrement lors de la phase d'initiation durant laquelle les processus chimiques sont lents et d'impact modérés. La distribution de ∇c quand à elle résulte du couplage entre les propriétés cinétiques 0D et les mécanismes de transport 3D. Pour un mélange gazeux réactif fixé, le principal levier d'action pour éviter l'auto-inflammation en régime homogène et d'éventuelles fortes ondes de pression réside donc dans le contrôle du mélange turbulent du scalaire passif T_0 . Dans ce cas, limiter l'apparition de zones où u_{sp} est élevée, c'est-à-dire les zones où l'auto-inflammation peut potentiellement générer de fortes ondes de pression, revient donc à limiter l'apparition de structures cohérentes, à temps de vie supérieur au délai d'auto-inflammation. Cette conclusion sera utilisée lors de la construction du diagramme d'auto-inflammation présenté dans la sous-section 5.4.5.

5.4.4.6 Tabulation à volume constant ou à pression constante ?

Pour les applications moteur, il convient de déterminer s'il est plus pertinent de modéliser l'auto-inflammation dans l'écoulement par la tabulation des réponses des réacteurs homogènes à pression constante, ou à volume constant. En effet, pour des conditions thermochimiques initiales identiques, les deux types de réacteurs ne montrent pas les mêmes délais d'auto-inflammation, les trajectoires dans l'espace des phases réduit étant différentes, comme le montre Embouazza dans son manuscrit de thèse [30] pour des cinétiques complexes. Plus récemment, Jay et Colin [59] montrent notamment que la variation temporelle du volume d'un réacteur homogène joue un rôle prépondérant dans l'auto-inflammation. Pour reproduire toutes les trajectoires thermochimiques possibles dans l'espace des phases réduit, les auteurs proposent une méthode originale de tabulation pour laquelle le comportement de l'auto-inflammation dans un cylindre de moteur diesel est modélisé à l'aide des réponses de réacteurs homogènes dont le volume est une fonction imposée du temps. La variation temporelle du volume \dot{V} apparaît donc comme un nouveau paramètre d'entrée dans les tables ; elle rend compte, de manière globale de la compression volumétrique du mélange par le piston mais les phénomènes locaux de compression/dilatation ne sont pas considérés.

La dilatation thermique est le phénomène physique qui induit la différence des évolutions de la thermochimie entre un réacteur à pression constante et un réacteur à volume constant. On a montré dans la section 5.4.4.4 que l'équation 5.40 sous sa forme lagrangienne devenait l'équation 5.59 : c'est l'équation de conservation de l'énergie dans un écoulement, en négligeant le terme de diffusion. Dans l'équation 5.59, le deuxième terme du membre de droite représente la contribution de la dilatation au bilan d'énergie. A volume constant, ce terme est nul, la divergence de la vitesse étant nulle. A pression constante cependant, on montre par différentiation de l'équation des gaz parfaits et en utilisant l'équation de continuité que $DT/Dt = T \nabla \cdot \mathbf{u}$. Une fois injecté dans l'équation 5.59, cette relation permet d'obtenir que pour un réacteur homogène à pression constante (P).

$$(\nabla \cdot \mathbf{u})^P(c, T_0) = \frac{1}{c_p(T_0 + T_{ref} \frac{\alpha}{1-\alpha} c)} \dot{\omega}_T^P(c, T_0). \quad (5.63)$$

Le post-traitement des données de la DNS permet d'extraire le champ $\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$. On peut alors calculer le champ $\Delta(\mathbf{x}, t)$ défini comme

$$\Delta(\mathbf{x}, t) = \frac{(\nabla \cdot \mathbf{u})(\mathbf{x}, t)}{(\nabla \cdot \mathbf{u})^p(c(\mathbf{x}, t), T_0(\mathbf{x}, t))}. \quad (5.64)$$

Celui-ci vaut 0 dans le cas d'une auto-inflammation à volume constant, 1 à pression constante et peut rendre compte des comportements intermédiaires des réacteurs.

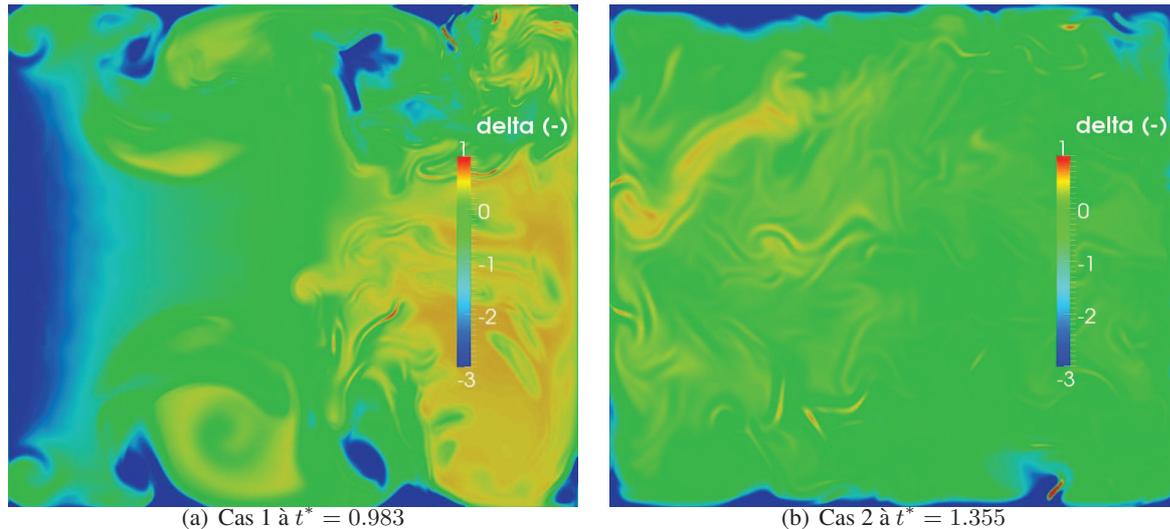


FIGURE 5.34 – Coupes longitudinales du champ de Δ (-) défini dans l'équation 5.64, juste avant l'auto-inflammation dans les deux cas.

On remarque sur la figure 5.34 que le comportement à volume constant ($\Delta = 0$) domine globalement dans les zones ne subissant pas l'influence des mur, mais où l'impact de la chimie est encore faible. Ailleurs, dans les régions en train de s'initier, la dynamique de la combustion tend vers celle d'un réacteur à pression constante, tandis que les zones proches parois ou encore les gaz frais de l'admission dans le cas 1 subissent la compression ($\Delta < 0$) des gaz plus chauds se dilatant. En calculant les statistiques conditionnées $\langle \Delta | c \rangle$, on peut associer à un avancement c de la réaction un comportement moyen des volumes fluides et vérifier les tendances observées sur la figure 5.34 ; les résultats de ce traitement statistique sont présentés dans la figure 5.35. Ils confirment la première analyse menée sur la figure 5.34 : dans les deux cas, $\langle \Delta | c \rangle$ augmente avec c , une extrapolation des courbes permettant d'anticiper que $\langle \Delta | c \approx 1 \rangle \approx 1$. En d'autres termes, lorsque les processus chimiques sont lents, la tabulation des réponses de réacteurs à volume constant convient mieux et lorsque la chimie est rapide, l'auto-inflammation se développe à pression constante, la tabulation à pression constante étant alors plus indiquée. L'évolution de la nature de l'auto-inflammation est continue entre ces deux cas limites.

Afin de prendre en compte ces effets de combustion à pression constante et à volume constant, on peut imaginer une stratégie de tabulation hybride (*hyb*) en tirant profit des informations locales apportées par la quantité Δ . Les quantités thermo-chimiques pourraient donc être calculées à partir des quantités

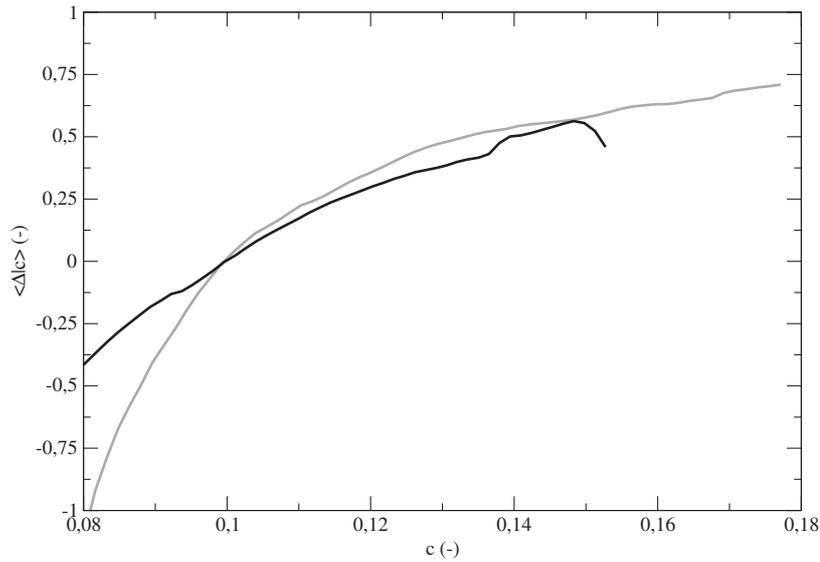


FIGURE 5.35 – $\langle \Delta|c| \rangle$ en fonction de c juste avant l'auto-inflammation, pour le cas 1 (à $t^* = 0.983$, en noir) et 2 (à $t^* = 1.355$, en gris).

tabulées à pression constante (p) et volume constant (v), en utilisant la pondération suivante par exemple

$$\psi^{hyb}(c, P, h, \rho, e_i) = \Delta(c, T_0^p(c, P, h))\psi^p(c, T_0^p(c, P, h)) + (1 - \Delta(c, T_0^p(c, P, h)))\psi^v(c, T_0^v(c, \rho, e_i)). \quad (5.65)$$

5.4.5 Diagramme des régimes d'auto-inflammation en mode CAI/HCCI

Comme on l'a souligné dans la sous-section 4.3.2, les différents régimes de l'auto-inflammation, phénomène instationnaire par nature, ne sauraient être délimités dans le diagramme de combustion tel que celui proposé par Borghi, construit à partir de quantités caractérisant la combustion prémélangée établie. Dans le chapitre 2 et dans ce chapitre, on a montré que le comportement de l'auto-inflammation en mode CAI/HCCI était très sensible aux propriétés locales de l'écoulement turbulent et du champ de température. En particulier, le temps de vie des structures cohérentes et le délai d'auto-inflammation apparaissent comme des quantités clés ; ces deux temps caractéristiques doivent donc guider la construction d'un diagramme des régimes d'auto-inflammation en mode CAI/HCCI.

Le rôle central joué par l'évolution temporelle des propriétés de l'écoulement a été récemment souligné et certaines quantités représentatives ont ainsi été mises en exergue par Enjalbert *et al.* [31]. A partir de ces quantités et afin de modéliser la combustion dans un milieu présentant des inhomogénéités de composition, les auteurs proposent une nouvelle méthodologie de tabulation de la chimie, avec des paramètres d'entrée définis à partir des propriétés locales de l'écoulement et basés sur trois temps caractéristiques : un temps de résidence, un temps d'engouffrement ainsi qu'un temps de mélange. Plus particulièrement, une partie de l'analyse se focalise sur l'évolution temporelle de la concentration d'un scalaire au sein d'un tourbillon cohérent. En transposant cette analyse au problème de l'auto-inflammation dans un milieu présentant des inhomogénéités de température cette fois-ci, on

peut construire le diagramme 5.36, qui permet de synthétiser toutes les informations physiques clefs ressortant de l'étude menée dans ce chapitre. On y présente l'évolution de la température normalisée d'un volume fluide piégé à l'intérieur d'une structure cohérente, à l'image des tourbillons de Kelvin-Helmholtz observés dans les simulations directes 3D de la chambre de combustion de la MCR. Deux phases importantes marquent cette évolution :

1. du point mort bas au point mort haut : la température du volume fluide augmente selon la loi de compression adiabatique. Les pertes thermiques induites par les parois froides n'affecte pas le coeur du tourbillon, qui reste adiabatique et constitue donc un site privilégié d'auto-inflammation ;
2. après le point mort haut : en fonction des propriétés de la dynamique du tourbillon considéré, représentées par le rapport de son temps caractéristique de mélange moléculaire et son temps caractéristique d'engouffrement [84]¹⁰, la température d'un volume fluide en son sein peut suivre plusieurs chemins :
 - pour un temps chimique, identifié au délai d'auto-inflammation, suffisamment court, l'auto-inflammation peut se produire dans un tourbillon cohérent où le champ de température est encore peu affecté par les pertes thermiques. Ainsi, des zones potentiellement grandes de l'écoulement peuvent s'initier en masse, selon un régime d'auto-inflammation dit quasi-homogène ;
 - pour un délai d'auto-inflammation plus long, le champ de température subit les pertes thermiques imposées par les parois et le tourbillon perd peu à peu son statut de site d'auto-inflammation privilégié. L'auto-allumage peut alors s'amorcer dans des régions où les effets de compression locale (ou d'autres mécanismes dans des systèmes plus complexes) génèrent des fluctuations positives de température, ténues mais décisives. Dans ce cas, tous les détails fins de l'écoulement deviennent donc importants et l'auto-inflammation apparaît comme un phénomène stochastique et se produit selon un régime dit localisé, en de multiples sites répartis de manière disparate dans la chambre de combustion.

En outre, l'analyse de Zel'dovich permet d'associer les deux régimes d'auto-inflammation à deux comportements bien différents du champ de pression. Ces derniers ont des implications de première importance pour les motoristes :

- dans l'auto-allumage en régime quasi-homogène, le noyau, dont l'extension spatiale est grande, peut montrer des zones où les faibles gradients de température sont tels que la vitesse de propagation du front d'auto-inflammation est proche de la vitesse du son, rendant possible le couplage spatial constructif entre la chimie et l'acoustique. Ce régime peut donc s'accompagner d'ondes de pression de forte amplitude, leur effet sur le moteur étant destructeur ;
- dans l'auto-allumage en régime localisé, idéalement multi-points, les gradients de température au niveau des petits noyaux sont trop importants pour que le couplage entre la chimie et l'acoustique soit possible. Ce régime ne génère pas d'ondes de pression significatives et doit donc être privilégié dans les moteurs CAI/HCCI, par les constructeurs automobiles.

10. Ce rapport pouvant être vu comme l'inverse d'une mesure de la propension qu'a le tourbillon à isoler thermiquement du reste de l'écoulement la portion de fluide qu'il piège.

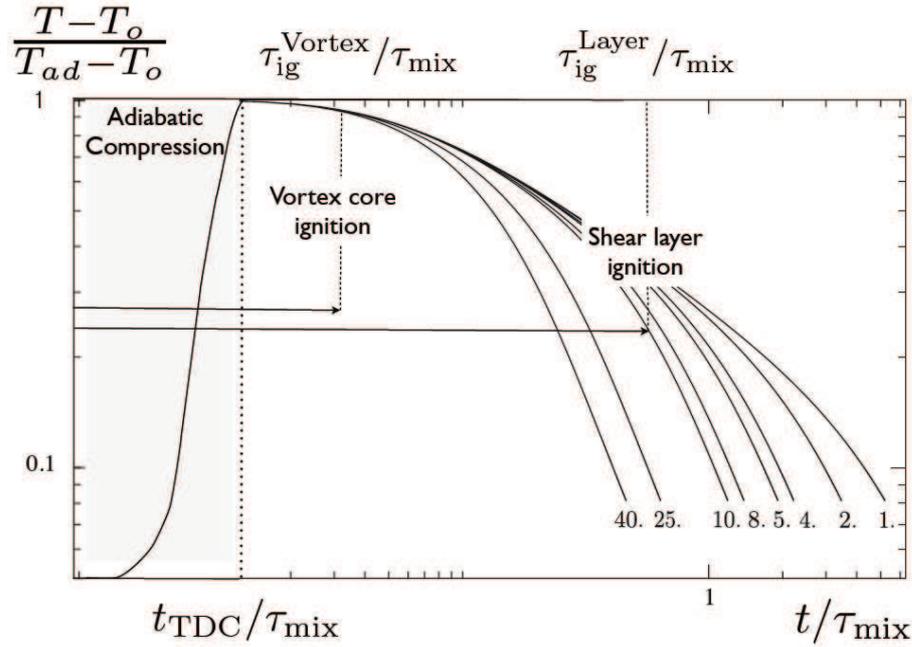


FIGURE 5.36 – Diagramme de l'évolution temporelle de la température normalisée avant l'auto-inflammation, construit à partir de solutions analytiques du mélange d'un scalaire dans des tourbillons [31]. Les nombres sous les courbes correspondent à des rapports arbitraires du temps caractéristique de mélange moléculaire et du temps caractéristique d'engouffrement. Les axes sont normalisés par le temps de mélange et la température de compression adiabatique obtenue au point mort haut. τ_{ig}^{Vortex} et τ_{ig}^{Layer} sont arbitraires ici.

5.5 Conclusions

On a réalisé une série de simulations aux grandes échelles de la chambre de combustion d'une MCR [48, 47] dans laquelle l'écoulement inerte généré par une grille de turbulence est rapidement comprimé. Le but de cette étude était de calibrer des conditions aux limites sur le plan d'admission de la chambre, de façon à reproduire numériquement un écoulement turbulent représentatif de celui observé expérimentalement. Une fois cette étape de modélisation validée, le volume de la chambre de combustion a été réduit d'un facteur 4 par direction, afin de pouvoir effectuer des DNS de l'écoulement, mettant en oeuvre une chimie globale et résolvant les équations discrétisées de l'aérothermochimie sur environ 70 millions de mailles, pour une résolution de 20 μm . La séquence d'admission modélisée précédemment a bien entendu été conservée.

Les transferts thermiques aux parois, favorisés par l'écoulement turbulent généré par les conditions aux limites d'admission, sont responsables de la stratification du champ de température, et les mécanismes contrôlant le développement de l'auto-inflammation dans ces conditions thermodynamiques sont analysés. Durant la phase de compression rapide, des structures cohérentes sont générées dans la chambre de combustion. La température dans ces rouleaux évolue selon trois mécanismes en compétition : la compression adiabatique induite par le piston, le mélange par engouffrement du fluide froid provenant des parois avec le fluide chaud piégé au coeur des tourbillons et la diffusion moléculaire. Dans ce

contexte, les deux scénarios principaux d'auto-inflammation ont pu être retrouvés numériquement :

- pour des délais d'auto-inflammation plus petit que le temps nécessaire à la déstabilisation des tourbillons cohérents, le coeur de ces tourbillons peut être vu comme isolé thermiquement du reste de l'écoulement et présente une distribution quasi-homogène de la température. Il ne subit que l'effet homogène de la compression volumétrique et se comporte donc comme un coeur adiabatique. L'auto-allumage a alors lieu selon un régime quasi-homogène, qui s'accompagne d'ondes de pression importantes résultant d'un phénomène de résonance entre le front de propagation chimique et les ondes acoustique, caractérisé par Zel'dovich [133]. Ce régime d'auto-allumage est particulièrement déconseillé pour des applications de type CAI/HCCI, pour les effets incontrôlables et destructeurs qu'il peut avoir sur le moteur ;
- si les phénomènes de mélange turbulent et moléculaire ont disposé d'un temps suffisant pour affecter le champ de température partout dans la chambre de combustion avant l'auto-inflammation, la sélection des sites privilégiés d'auto-inflammation est contrôlée par les détails locaux de l'écoulement, pouvant par exemple induire des effets de compression localisée entre les structures turbulentes. Dans ce cas, l'auto-allumage a lieu de manière stochastique en de multiples points de l'écoulement, les prédictions de la localisation des sites étant, par conséquent, plus incertaines. Aucune onde de pression significative n'est générée par ce régime d'auto-inflammation, qui devrait donc être favorisé par les constructeurs automobiles.

Une analyse complémentaire, basée sur un post-traitement utilisant une tabulation de réacteurs homogènes, a permis de confirmer ces observations. Dans ce nouveau paradigme, l'étude de l'auto-inflammation est grandement facilitée. Il a ainsi été possible d'éprouver les hypothèses de combustion à pression constante ou à volume constant, pour finalement montrer que l'historique réel de l'auto-inflammation ne pouvait être représenté parfaitement par l'une ou par l'autre. Ainsi, on a observé que les phénomènes chimiques lents étaient mieux décrits par la tabulation à volume constant, alors que le comportement de la combustion lors de l'emballement thermique caractéristique de l'auto-inflammation tendait vers celui d'une combustion à pression constante. Une approche hybride de tabulation a donc été proposée. Elle est basée sur une pondération des réponses des réacteurs à pression et volume constant, tenant compte des détails locaux de l'écoulement. Elle reste cependant à mettre en oeuvre numériquement pour réaliser des simulations de cycle moteur.

Il est bien évident que la prise en compte d'une chimie détaillée et de propriétés de transport plus réalistes révélerait des mécanismes d'auto-allumage beaucoup plus complexes, mais les observations et analyses portant sur la topologie du champ de température, dont l'importance est reconnue comme capitale juste avant le brusque dégagement de chaleur, ne devraient pas être remises en question. C'est la raison pour laquelle les scénarios globaux de l'auto-inflammation ne devraient pas être profondément modifiés dans une description plus riche de la physique. Cependant, il convient de noter que dans les moteurs à combustion interne de type CAI/HCCI, dont la structure est beaucoup plus complexe, d'autres sources de stratification thermique sont présentes et peuvent modifier les conclusions tirées ci-dessus. Leurs contributions sont difficiles à quantifier si l'on n'élargit pas le domaine d'étude à des organes du moteur autres que la chambre de combustion. Et là encore, l'approche DNS se trouve rapidement limité par les moyens de calcul.

Chapitre 6

Conclusion générale

Sommaire

6.1 Conclusions	161
6.2 Perspectives	162

6.1 Conclusions

Dans le vaste panorama de la combustion turbulente, l’auto-inflammation dans un moteur de type CAI/HCCI pourrait apparaître comme un phénomène simple, dans la mesure où la composition du mélange réactif est supposée parfaitement homogène, ce qui est déjà une hypothèse lourde. Cependant, même sans remettre en cause la véracité de cette supposition, une étude approfondie des mécanismes fins montrent que ces conditions idéales ne font que davantage ressortir, d’une part, l’extrême sensibilité du phénomène à la topologie du champ de température, et d’autre part, la difficulté de décrire le phénomène d’auto-allumage de façon purement déterministe, car ce champ de température est conditionné par la turbulence.

Il est évident que la cinétique chimique a un impact de premier ordre dans l’initiation et le développement de l’auto-inflammation ; cette observation a orienté les stratégies d’étude numérique vers des approches privilégiant la prise en compte des détails cinétiques 0D à la description fidèle des phénomènes de transport moléculaire ou turbulent. Ces approches multi-zones et leur potentiel ont été présentées dans le chapitre 2. Les résultats mettent en évidence des limites prédictives de ces modèles qui sous-estiment, par nature, l’importance des fluctuations de température, essentielles à la description de l’auto-inflammation en régime CAI/HCCI. D’un autre côté, la complexité numérique inhérente à la simulation directe, avec mise en oeuvre d’un schéma cinétique complexe, rend l’application de cette approche tout simplement inaccessible à la description de configurations s’éloignant de cas canoniques bi-dimensionnels. Des stratégies intermédiaires ont également été adoptées. Elles permettent d’étudier en 3D le couplage fin entre la chimie de l’auto-inflammation, représentée par un mécanisme global, et les mécanismes de transport, dont toutes les échelles spatio-temporelle sont rigoureusement résolues. Cependant, les champs turbulents initiaux sont obtenus par la prescription de spectres de THI, dont la représentativité dans des cas réels est discutable.

Pour analyser numériquement les interactions physico-chimiques propres à l'auto-allumage dans un moteur CAI/HCCI, la méthode de tabulation de la thermochimie a également été mise en oeuvre. Ces principes, ainsi que son potentiel, sont exposés dans le chapitre 4. En exploitant des hypothèses empruntées à la théorie de flammelettes et son extension pour les réacteurs homogènes, la tabulation permet de reproduire des propriétés fondamentales de la combustion, avec une prise en compte d'effets de chimie complexe, à des coûts numériques bien moindres que ceux nécessités par l'utilisation d'un schéma cinétique complexe. Dans ce contexte, une nouvelle stratégie de résolution *in-situ* des équations de la thermochimie des flammelettes de prémélange étirées a également été proposée ; son potentiel a été démontré dans des validations sur des cas 1D. Un important travail reste, toutefois, à fournir pour intégrer cette nouvelle approche dans la simulation d'écoulements réactifs 3D.

L'objectif central de cette thèse a été d'étudier numériquement les interactions fines entre les processus chimiques et l'aérodynamique, dans un écoulement réactif représentatif de celui généré dans la chambre de combustion de la machine à compression rapide du laboratoire de l'IJLRA de l'UPMC (*c.f.* chapitre 5). Il a donc été possible d'analyser, en espace et en temps, l'impact de l'historique d'une turbulence inhomogène et anisotrope, et du champ de température turbulent résultant, sur l'initiation et le développement de l'auto-inflammation. Dans cette étude, les processus chimiques sont modélisés globalement ; on rend compte d'un dégagement de chaleur chimique effectif modèle, sans décrire les sous-phénomènes multi-échelles impliqués dans une cinétique complexe. Toutes les échelles du transport sont, quant à elles, résolues sur le maillage, selon l'approche DNS. Malgré une description de la chimie simplifiée à l'extrême, cette étude a permis de caractériser deux régimes d'auto-allumage aux conséquences bien différentes pour les constructeurs automobiles :

1. un régime pour lequel l'auto-allumage se produit quasiment en masse sur toute une portion du volume de la chambre de combustion, s'accompagnant éventuellement de fortes ondes de pression. Il est donc critique pour le moteur ;
2. un régime pour lequel les sites d'auto-allumage ont un volume suffisamment petit pour que l'auto-allumage ne génère pas d'onde de pression. La localisation exacte de ces sites est très difficile à prédire, dans la mesure où elle dépend de l'historique de l'écoulement et de tous les détails fins impliqués dans la formation de zones plus réactives.

Une analyse complémentaire, basée sur un post-traitement utilisant une tabulation de réacteurs homogènes, a confirmé ces observations et permis d'étendre l'étude. On a ainsi mis en évidence l'importance de la prise en compte des effets de pression constante ou de volume constant sur la validité du modèle d'auto-inflammation. Une méthode de tabulation hybride, combinant les réponses de réacteurs homogènes à pression constante et à volume constant en les pondérant par une quantité rendant compte des effets locaux de compression/dilatation, a alors été proposée. Enfin, les éléments de compréhension apportés par l'étude menée dans ce chapitre 5 ont permis d'extraire les informations principales permettant de délimiter les deux régimes et ainsi, de tracer les grandes lignes d'un diagramme des régimes d'auto-inflammation en CAI/HCCI.

6.2 Perspectives

Les premières étapes nécessaires à la mise en oeuvre, dans le code SiTCom, d'une méthode de tabulation des réponses de réacteurs homogènes, sont finalement présentées, dans les annexes de ce manuscrit. La stratégie d'étude proposée comporte deux phases :

1. durant la phase de compression, du point mort bas jusqu'au point mort haut, l'écoulement est supposé inerte. La séquence d'admission déterminée dans le chapitre 5 est conservée, mais ici, des variations spatiales et temporelles des coefficients de capacité calorifique sont considérées. Ces propriétés thermodynamiques sont tabulées et les conditions d'admission NSCBC-3D ont été adaptées en conséquence ;
2. après le point mort haut, l'écoulement dans le volume fermé de la chambre de combustion est considéré comme réactif et la thermochimie est alors décrite par des tables de réponses de réacteurs homogènes. Une méthode de détermination de la valeur du terme source de la variable d'avancement pour $c = 0$, permettant d'amorcer la chimie en reproduisant les bons délais d'auto-inflammation, a été proposée et validée pour des réacteurs homogènes à pression constante, ou à volume constant. En outre, un solveur permettant de déterminer les conditions thermodynamiques des gaz frais à partir des quantités transportées, a été développé. Il est basé sur la conservation de l'enthalpie dans le cas d'une combustion à pression constante, ou de l'énergie interne, à volume constant.

Une autre perspective réside dans l'implantation de la méthode de tabulation hybride proposée dans la sous-section 5.4.4.6 du chapitre 5. Deux difficultés peuvent être anticipées et sont liées à la définition du coefficient de pondération Δ (c.f. équation 5.64). Tout d'abord, les calculs 0D des réponses de réacteurs homogènes à pression constante et intégrant une chimie complexe, montrent que, pour des petites valeurs de la variable d'avancement, la divergence de la vitesse imposée par la dilatation est négative et très proche de 0 et devient positive après. Or, cette quantité tabulée apparaît au dénominateur dans la définition de Δ , ce qui soulève un problème de division par 0. De plus, dans les zones de l'écoulement subissant une compression, la divergence de la vitesse, apparaissant au numérateur dans la définition de Δ , est négative et Δ peut donc devenir négatif ; dans ce cas, la pertinence de la technique de pondération des tables est discutable. Des stratégies complémentaires doivent donc être mises en oeuvre pour contourner ces incohérences.

Enfin, l'auto-inflammation peut être étudiée d'un point de vue nouveau, dans un cadre théorique qui semble parfaitement adapté. En premier lieu, le rôle central de la topologie du champ de température dans la sélection du régime d'auto-inflammation en régime CAI/HCCI est maintenant bien reconnu. Plus précisément, l'amplitude des fluctuations, ainsi que leur extension spatiale ont été identifiées comme des critères permettant de délimiter, d'une part, les régimes d'auto-inflammation déflagratifs, associés à l'auto-allumage localisé, pour lesquels les phénomènes acoustiques ont un impact très modéré, et d'autre part, les régimes de propagation spontané, plutôt associés à l'auto-allumage homogène, et s'accompagnant de fortes ondes de pression. En second lieu, durant la phase d'initiation, la température peut être considéré comme un scalaire passif. Ces deux caractéristiques font apparaître le paradigme des éléments dissipatifs comme un cadre de description de l'auto-allumage tout à fait pertinent. Proposée par Wang et Peters [101, 126, 127], cette approche géométrique permet de décomposer l'ensemble d'un champ turbulent associé à un scalaire passif (la température par exemple), en un ensemble « d'éléments », définis de façon à recouvrir complètement le volume d'étude, et pouvant être caractérisés simplement par une dimension spatiale et l'écart entre les valeurs maximales et minimales du champ pour l'élément considéré. En utilisant ces deux quantités et en définissant, à partir d'elles, un gradient caractéristique de l'élément de température par exemple, on pourrait rapidement extraire les informations essentielles de la topologie du champ de température, afin de caractériser la nature du régime d'auto-inflammation.

Annexe A

Vers la DNS de la MCR avec thermochimie tabulée

A.1 Introduction

Cette annexe a pour but de présenter les étapes préliminaires à la mise en oeuvre de la tabulation des réponses de réacteurs homogènes, avec prise en compte d'effets de chimie complexe, dans le solveur SiTCom (*c.f.* section 3.3). Faute de temps, aucune simulation d'écoulement réactif subissant l'auto-inflammation n'a pu être mise en oeuvre durant cette thèse. Le contenu de ce chapitre s'intègre donc dans le cadre des perspectives.

Dans la première section de ce chapitre, les hypothèses de modélisation utilisées seront présentées. Logiquement, elles devront être moins restrictives que celles utilisées dans les DNS menées dans le chapitre précédent, puisqu'elles doivent mener à une description plus réaliste des mécanismes de l'auto-inflammation.

De plus, on souhaite maintenant que la thermodynamique prenne en compte les variations spatiales et temporelles des capacités calorifiques dues aux variations de température, et, si nécessaire, de composition, l'objectif ici n'étant plus de décrire spécifiquement la combustion en régime homogène de type CAI/HCCI, mais d'aborder l'auto-inflammation dans un contexte plus général. Pour y parvenir numériquement, une stratégie différente de celle adoptée dans le chapitre précédent doit être adoptée pour calculer la température à partir des grandeurs transportées. En outre, le traitement des conditions aux limites NSCBC par le code SiTCom doit être adapté en conséquence. La deuxième section de ce chapitre exposera le travail effectué en ce sens.

On souhaite décrire, par l'intermédiaire d'une méthode de tabulation, l'auto-inflammation du méthane selon le schéma cinétique GRI-MECH3.0 [108] ; celui-ci inclut 53 espèces évoluant dans 325 réactions. Même si, techniquement, la stratégie est très semblable à celle que l'on déploie dans le cas de la tabulation des réponses de flammes de prémélange, des difficultés propres à la nature de la combustion que l'on souhaite représentée, apparaissent ici. Certains auteurs proposent une direction supplémentaire pour l'enthalpie, ou de façon équivalente pour la température, afin de modéliser l'effet des pertes thermiques [33, 35], mais la pression est systématiquement supposée constante dans le domaine, les fluctuations spatio-temporelles de pression étant supposées suffisamment faibles pour que l'hypothèse d'isoba-

ricité puisse être justifiée. Pour décrire l’auto-inflammation dans un milieu subissant une compression volumétrique par un piston, il est évident que l’hypothèse de combustion isobare doit être relaxée. En plus de la fraction de mélange \mathcal{Z} et de la variable d’avancement Y_c (notée c sous forme normalisée), la connaissance des conditions thermodynamiques des gaz frais apparaît donc comme essentielle à la détermination du vecteur position dans l’espace des phases réduit, c’est-à-dire à la détermination du vecteur d’entrée dans les tables. En outre, une représentation de l’évolution temporelle d’un réacteur homogène en fonction de Y_c introduit un biais numérique. En effet, dans les tables, si l’on associait à $Y_c = 0$, une valeur du terme source $\dot{\omega}_{Y_c}$ nulle, comme c’est logiquement le cas pour un réacteur homogène dans son état initial¹, la réaction serait gelée. Une méthode doit donc être proposée pour contourner ce problème.

A.2 Hypothèses de modélisation

Le coefficient de viscosité dynamique μ est estimé à partir de la loi de Sutherland, appliquée à l’air, ce qui revient donc à supposer que les autres espèces ont un impact négligeable sur le calcul de la viscosité. Comme dans les DNS menées dans le chapitre précédent, les fluctuations de température dans la chambre de combustion sont obtenues en imposant des pertes thermiques au niveau des parois, également prises en compte numériquement par la prescription d’un coefficient de convection $h = 40 \text{ W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$. En plus, on souhaite inclure ici des fluctuations de composition par l’intermédiaire de fluctuations de fraction de mélange \mathcal{Z} , en imposant un profil de \mathcal{Z} sinusoïdal autour de la valeur stoechiométrique \mathcal{Z}_{st} au niveau du plan d’admission.

L’évolution de la thermochimie des volumes fluides dans l’écoulement turbulent est assimilée à celle de réacteurs homogènes, dont la réponse est paramétrée par le vecteur $\Phi = (Y_c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)^T$ (c.f. sous-section 4.4.4.3). L’hypothèse de nombre de Damköhler élevés est donc adoptée. Ici encore, l’hypothèse de nombres de Lewis tous unitaires est faite, selon laquelle les phénomènes de diffusion différentielle sont négligeables. En conséquence, la fraction de mélange \mathcal{Z} est un scalaire passif, à travers lequel tous les processus de mélange peuvent être suivis de manière effective. La variable d’avancement est définie de façon à pouvoir suivre correctement l’auto-inflammation du méthane dans l’air dans le domaine de chimie vive, comme la combinaison linéaire suivante

$$Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H_2O}. \quad (\text{A.1})$$

Pour faciliter cette étude exploratoire, on utilise une hypothèse, basée sur une condition nécessaire à la validité d’une MCR, selon laquelle la phase de compression est suffisamment rapide pour que les processus chimiques n’aient pas le temps de s’y amorcer. En d’autres termes, le fluide, constitué d’un mélange de méthane et d’air, est considéré comme inerte durant la phase d’admission et $Y_c^{adm} = Y_{CO}^{adm} + Y_{CO_2}^{adm} + Y_{H_2O}^{adm} = 0$ jusqu’à l’instant du point mort haut. Pour valider cette hypothèse dans le cas de l’auto-inflammation du méthane, des calculs en chimie complexe 0D sont effectués à l’aide du code CANTERA [44]. Ils permettent de décrire l’évolution temporelle de la thermochimie d’un réacteur dont le volume est une fonction donnée du temps. Les mécanismes chimiques impliqués dans la réaction sont décrits par l’intermédiaire du schéma cinétique GRI-MECH3.0 [108]. L’évolution temporelle du volume du réacteur est obtenue à partir de l’interpolation de la vitesse du piston mesurée lors d’essais effectués

1. A $t = 0$, c’est-à-dire à $Y_c = 0$, le réacteur est dans son état initial et les termes sources chimiques sont tous nuls ; en conséquence, $\dot{\omega}_{Y_c} = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \alpha_k \dot{\omega}_k = 0$

Z (-)	P ₀ (atm)	T ₀ (K)
Z _{st} =0.055066	0.2	400

TABLE A.1 – Conditions thermochimiques initiales du calcul de réacteur homogène à volume fonction du temps.

sur la MCR (*c.f.* figure 5.2). On a alors une idée de l'évolution des grandeurs thermochimiques dans la MCR en négligeant tous les phénomènes de transport, c'est-à-dire dans le coeur adiabatique. Comme il correspond à un site qui ne subit pas les pertes thermiques ralentissant la réaction, il est associé à la valeur maximale de Y_c dans la chambre de combustion. Ainsi, si l'hypothèse $Y_c = 0$ est vérifiée pour le cas le plus sévère d'un réacteur homogène, elle le sera nécessairement dans tout le volume de la chambre de combustion. De plus, pour rendre cette validation encore plus stricte, plutôt que de raisonner sur Y_c qui est définie à partir d'espèces majoritaire évoluant principalement quand le dégagement de chaleur chimique est vif, on peut transposer la validation sur une espèce radicalaire minoritaire dont la dynamique rythme les tous premiers instants de l'auto-inflammation. Le peroxyde d'hydrogène H_2O_2 vérifie bien cette propriété. Sur la figure A.1, on montre les évolutions en fonctions du temps adimensionné par le temps du point mort au t_{TDC} , de la température (A.1(a)), la pression (A.1(b)), Y_c (A.1(c)) et de $Y_{H_2O_2}$ (A.1(d)). Les conditions thermochimiques initiales sont récapitulées dans la table A.1. Du point mort bas ($t^* = 0$) jusqu'au point mort haut ($t^* = 1$), la pression et la température subissent l'effet de la compression adiabatique du volume du réacteur par le piston. Un plateau est ensuite observé ; il correspond à la phase durant laquelle les radicaux sont formés en quantité suffisante pour que les réactions exothermiques de l'auto-allumage s'emballent. Durant cette seconde phase, la fraction massique du H_2O_2 , et *a fortiori*, Y_c , restent nulles, ce qui valide l'hypothèse d'écoulement inerte durant la phase de compression, du moins pour les conditions initiales choisies ici.

A.3 Simulation numérique directe de la chambre de combustion durant la phase d'admission

A.3.1 Tabulation de la thermodynamique durant la phase de compression

Dans SiTCom, il a été choisi de transporter l'énergie totale non-chimique, c'est-à-dire la somme de l'énergie cinétique et de l'énergie sensible (*c.f.* équation 3.15) qui sont donc toutes deux des quantités connues en chaque point du maillage. Pour déterminer la pression P par la loi des gaz parfaits, il est nécessaire de déterminer, en plus de la masse volumique ρ obtenue par l'intégration de l'équation de continuité 3.22, la masse molaire moyenne du mélange \bar{W} , ainsi que la température T , ce problème étant le même pour un écoulement inerte ou réactif. La tâche était grandement simplifiée dans les DNS de la chambre de combustion de la MCR de l'IJLRA de l'UPMC, présentées dans le chapitre précédent, où l'on avait supposé que les capacités calorifiques étaient constantes. De cette hypothèse découlait le fait que \bar{W} était également constante, ainsi qu'une relation très simple entre l'énergie interne et la température

$$T = \frac{e_s}{c_v}. \quad (\text{A.2})$$

La détermination de la température ne posait donc aucun problème particulier dans le cas de ces simulations. Cependant, pour des capacités calorifiques variables, le problème est beaucoup plus complexe, \bar{W} variant également, et la température ne pouvant plus être déterminée aussi simplement à partir

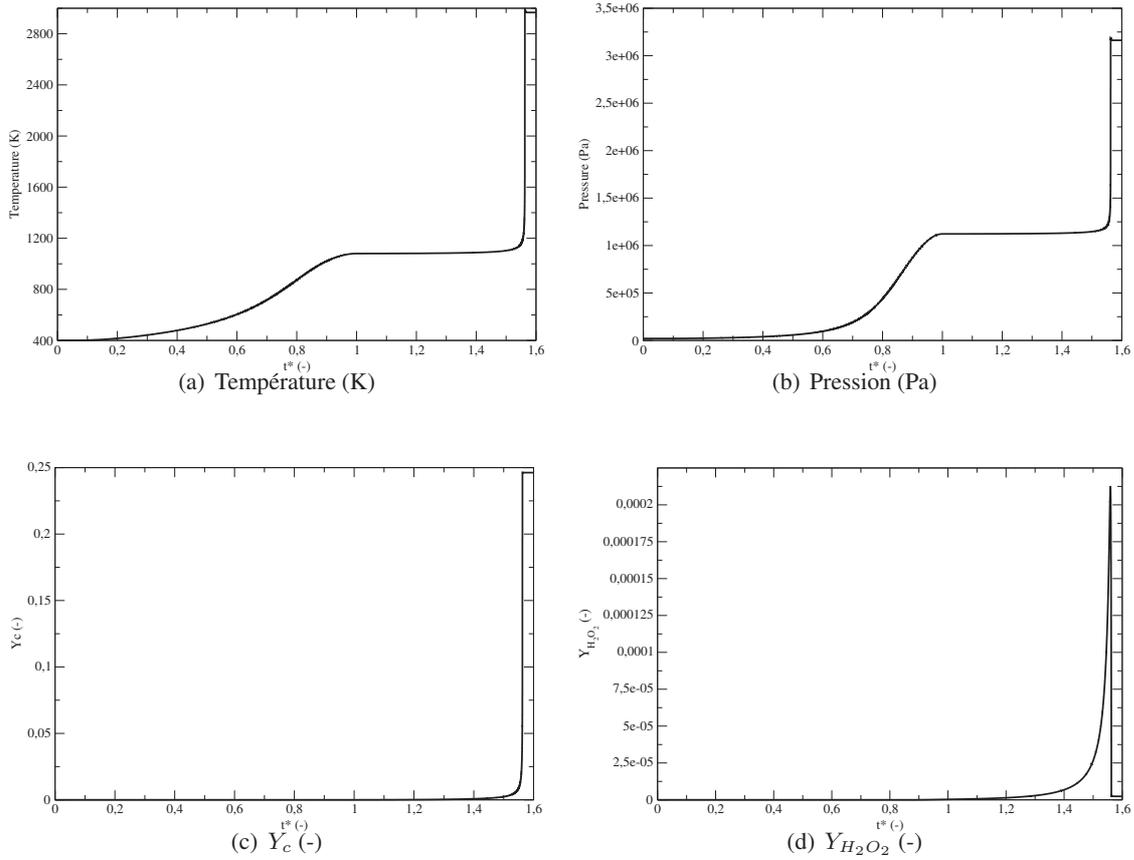


FIGURE A.1 – Evolutions de grandeurs thermochimiques en fonction du temps adimensionné dans un réacteur homogène dont le volume varie en fonction du temps adimensionné (réponse calculée par CANTERA).

de l'énergie sensible. L'objectif de ce chapitre est de présenter les étapes intermédiaires nécessaires à l'intégration d'une chimie complexe tabulée de réacteurs homogènes dans le code SiTCom.

Pour un mélange inerte, \bar{W} n'est fonction que du vecteur composition \mathbf{Y} , qui est associé ici à la fraction de mélange Z

$$\mathbf{Y} = \mathbf{Y}^u(Z), \quad (\text{A.3})$$

où l'exposant u signifie que la quantité est extraite de la table dans le cas inerte. La température peut être obtenue, en connaissant Z et e_s , par l'inversion de l'équation 3.14. Cette inversion n'étant pas possible analytiquement, on procède à la tabulation de la température en fonction de Z et e_s , comme proposé dans [10],

$$\bar{W} = \bar{W}^u(Z) \quad (\text{A.4})$$

$$\gamma = \gamma^u(Z, e_s) \quad (\text{A.5})$$

$$T = T^u(Z, e_s). \quad (\text{A.6})$$

Dans les fichiers de reprise de SiTCom, on ne stocke que la température et pour initialiser le champ de

e_s , on doit également générer la table

$$e_s = e_s^u(Z, T) \quad (\text{A.7})$$

$$\gamma = \gamma^u(Z, T). \quad (\text{A.8})$$

Remarque : il aurait été possible d'utiliser une seule table, à partir de laquelle, connaissant Z et e_s (ou T), on aurait pu déterminer T (ou e_s) et γ . Cependant, l'économie de mémoire que cette stratégie aurait permis est très modeste, le nombre de dimensions étant petit (deux entrées uniquement). On favorise ici le temps de calcul imputable à l'interpolation.

On présente, ci-dessous, le flow-chart du calcul des propriétés thermodynamiques par interpolation dans SiTCom.

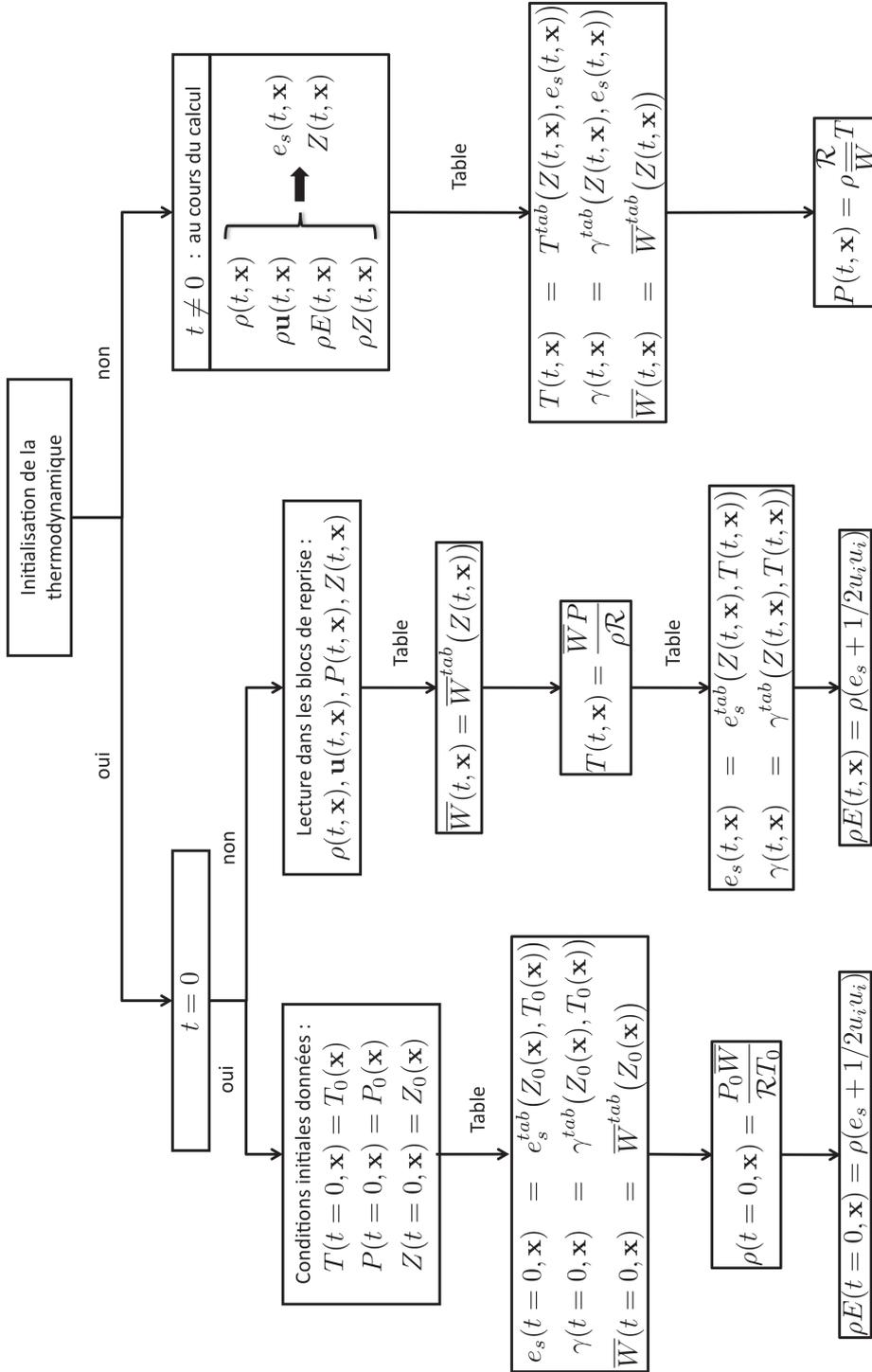


FIGURE A.2 – Organisation du calcul des propriétés thermodynamiques d'un gaz inerte dans SiTCom

A.3.2 Conditions aux limites d'entrée sur le plan d'admission

Le formalisme NSCBC mis en oeuvre dans les simulations directes présentées dans le chapitre précédent doit maintenant être adapté, de façon à prendre en compte de variations spatiales et temporelles des capacités calorifiques.

A.3.2.1 Conditions aux limites NSCBC pour une entrée, avec c_p et c_v variables

Formulation générale

γ étant variable, la compression n'est plus isentropique, mais adiabatique. On développe, dans la suite, les calculs permettant d'aboutir aux nouvelles équations NSCBC. La méthodologie est largement inspirée de celle présentée par Vicquelin dans son manuscrit de thèse [123]. Elle est simplement dégradée ici d'une approche réactive multi-espèces, où toutes les espèces sont transportées, à une approche inerte où la composition locale du mélange est suivie de façon effective par la fraction de mélange \mathcal{Z} , transportée comme un scalaire passif ($Le=1$).

Dans un premier temps, on rappelle quelques définitions :

- la constante du gaz r est définie comme $r = \mathcal{R}/\overline{W}$;
- l'énergie totale non-chimique E est la somme de l'énergie sensible e_s et de l'énergie cinétique e_c :

$$E = \int_{T_{ref}}^T c_v(T') dT' - rT_{ref} + \frac{1}{2} u_k u_k ; \quad (\text{A.9})$$

- le vecteur des variables conservatives s'écrit

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, P, \rho E, \rho \mathcal{Z})^T, \quad (\text{A.10})$$

et celui des variables primitives,

$$\mathbf{u} = (\rho, u_1, u_2, u_3, E)^T ; \quad (\text{A.11})$$

- le transport des variables conservatives s'écrit, sous forme vectorielle :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^k}{\partial x_k} + \frac{\partial \mathbf{F}_D^k}{\partial x_k} = \mathbf{0}, \quad (\text{A.12})$$

où

$$\mathbf{F}^k = \begin{pmatrix} \rho u_k \\ \rho u_1 u_k + \delta_{1k} P \\ \rho u_2 u_k + \delta_{2k} P \\ \rho u_3 u_k + \delta_{3k} P \\ (\rho e + P) u_k \\ \rho u_k \mathcal{Z} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{F}_D^k = \begin{pmatrix} 0 \\ -2\mu A_{1k} \\ -2\mu A_{2k} \\ -2\mu A_{3k} \\ -2\mu u_j A_{kj} - \frac{\mu c_p}{Pr} \frac{\partial T}{\partial x_k} \\ -\frac{\mu}{Sc} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial x_k} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.13})$$

L'équation vectorielle de conservation des variables conservatives A.12 peut être écrite sous une forme quasi-linéaire, en utilisant la matrice jacobienne permettant le passage des grandeurs conservatrices aux grandeurs primitives $\mathbf{P} = \partial \mathbf{U} / \partial \mathbf{u}$. Elle devient :

$$\mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}^k}{\partial \mathbf{u}} \mathbf{P} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial x_k} + \frac{\partial \mathbf{F}_D^k}{\partial x_k} = \mathbf{0}, \quad (\text{A.14})$$

qui devient, en notant $\partial \mathbf{F}^k / \partial U = \mathbf{J}^k$ et en la multipliant par \mathbf{P}^{-1} ,

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathbf{P}^{-1} \mathbf{J}^k \mathbf{P} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_k} + \mathbf{P}^{-1} \frac{\partial \mathbf{F}_D^k}{\partial x_k} = \mathbf{0}. \quad (\text{A.15})$$

Dans ce qui suit, on calcule les coefficients des matrices \mathbf{P} , \mathbf{P}^{-1} puis \mathbf{J}^k , en suivant la méthode proposée par Vicquelin [123], adaptée aux hypothèses de modélisation utilisées ici. Ainsi, on exprime les variations infinitésimales des variables conservatives en termes de variations infinitésimales des variables primitives.

Tout d'abord, on obtient trivialement

$$\partial \rho = \partial \rho, \quad (\text{A.16})$$

$$\partial \rho u_i = \rho \partial u_i + u_i \partial \rho \quad i = 1, 2, 3, \quad (\text{A.17})$$

et

$$\partial \rho \mathcal{Z} = \rho \partial \mathcal{Z} + \mathcal{Z} \partial \rho. \quad (\text{A.18})$$

De plus, en remarquant qu'en l'absence de réaction, r n'est fonction que de la composition, et donc ici de \mathcal{Z} , on a

$$\begin{aligned} \partial e_s &= c_v \partial T - T_{ref} \partial r \\ &= c_v \partial T - T_{ref} \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \mathcal{Z}. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

La loi des gaz parfait permet d'exprimer ∂T en fonction de $\partial \rho$, ∂P et \mathcal{Z}

$$\partial T = \frac{1}{\rho r} \partial P - \frac{T}{\rho} \partial \rho - \frac{T}{r} \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \mathcal{Z},$$

ce qui, une fois injecté dans l'équation A.19 donne

$$\partial e_s = -\frac{rT}{\rho \varkappa} \partial \rho + \frac{1}{\rho \varkappa} \partial P + \left(-\frac{T}{\varkappa} - T_{ref} \right) \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \mathcal{Z}. \quad (\text{A.20})$$

où

$$\varkappa = \gamma - 1 \quad (\text{A.21})$$

La variation infinitésimale de $\partial \rho E$ est finalement obtenue, à partir de la définition A.9 et de l'équation A.20,

$$\begin{aligned} \partial \rho E &= \partial \rho e_s + \partial \rho e_c \\ &= \left(e_s + e_c - \frac{rT}{\varkappa} \right) \partial \rho + \rho u_i \partial u_i + \frac{1}{\varkappa} \partial P + \rho \left(-\frac{T}{\varkappa} - T_{ref} \right) \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \mathcal{Z} \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ u_1 & \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \\ u_2 & 0 & \rho & 0 & 0 & 0 \\ u_3 & 0 & 0 & \rho & 0 & 0 \\ e_s + e_c - \frac{rT}{\varkappa} & \rho u_1 & \rho u_2 & \rho u_3 & \frac{1}{\varkappa} & \rho \left(-\frac{T}{\varkappa} - T_{ref} \right) \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \\ \mathcal{Z} & 0 & 0 & 0 & 0 & \rho \end{pmatrix}, \quad (\text{A.23})$$

La matrice inverse associée s'écrit :

$$\mathbf{P}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{u_1}{\rho} & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{u_2}{\rho} & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{u_3}{\rho} & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} & 0 & 0 \\ \varkappa(e_c - e_s) + rT & -\varkappa u_1 & -\varkappa u_2 & -\varkappa u_3 & \varkappa & (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{dZ} \\ +Z[-T - \varkappa T_{ref}] \frac{dr}{dZ} & 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \\ -\frac{Z}{\rho} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.24})$$

r (ou de manière équivalente, \overline{W}) et \varkappa (ou γ) doivent donc être connues. Elles sont déterminées, à partir des quantités transportées, par interpolation dans des tables, selon la méthode décrite dans la sous-section A.3.1.

On calcule maintenant les coefficients de la matrice des flux eulériens $\mathbf{J}^k = \partial \mathbf{F}^k / \partial \mathbf{U}$. Pour cela, on exprime les variations infinitésimales des flux eulériens en fonction des variations infinitésimales des grandeurs conservatives.

Tout d'abord, dans l'équation de continuité, on a, trivialement,

$$\partial \rho u_k = \partial \rho u_k; \quad (\text{A.25})$$

Ensuite, dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement, on a, pour $j=1,2,3$,

$$\partial \rho u_j u_k + \delta_{jk} \partial P = u_j \partial \rho u_k + \rho u_k \partial u_j + \delta_{jk} \partial P, \quad (\text{A.26})$$

avec

$$\begin{aligned} \rho u_k \partial u_j &= u_k (\rho \partial u_j) \\ &= u_k (\partial \rho u_j - u_j \partial \rho), \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

donc

$$\partial \rho u_j u_k + \delta_{jk} \partial P = -u_j u_k \partial \rho + u_j \partial \rho u_k + u_k \partial \rho u_j + \delta_{jk} \partial P. \quad (\text{A.28})$$

Pour l'équation de conservation l'énergie totale non-chimique, une variation infinitésimale du flux convectif s'exprime comme

$$\partial (\rho E + P) u_k = \partial \rho u_k E + \partial u_k P, \quad (\text{A.29})$$

avec

$$\begin{aligned} \partial \rho u_k E &= E \partial \rho u_k + \rho u_k \partial E \\ &= E \partial \rho u_k + u_k \partial \rho E - u_k E \partial \rho, \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

et

$$\begin{aligned} \partial u_k P &= u_k \partial P + P \partial u_k \\ &= u_k \partial P + \frac{P}{\rho} \partial \rho u_k - u_k \frac{P}{\rho} \partial \rho. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

On obtient finalement que

$$\partial (\rho E + P) u_k = -u_k \left(E + \frac{P}{\rho} \right) \partial \rho + \left(E + \frac{P}{\rho} \right) \partial \rho u_k + u_k \partial \rho E + u_k \partial P. \quad (\text{A.32})$$

Enfin, une variation infinitésimale du flux de fraction de mélange s'écrit

$$\begin{aligned}\partial \rho u_k \mathcal{Z} &= \mathcal{Z} \partial \rho u_k + \rho u_k \partial \mathcal{Z} \\ &= -u_k \mathcal{Z} \partial \rho + \mathcal{Z} \partial \rho u_k + u_k \partial \rho \mathcal{Z}.\end{aligned}\tag{A.33}$$

$$\tag{A.34}$$

Il est maintenant nécessaire d'exprimer ∂P . Pour cela, on inverse l'équation A.22, d'où il vient que

$$\begin{aligned}\partial P &= [rT - \varkappa(e_c + e_s)] \partial \rho - \rho \varkappa u_i \partial u_i + \varkappa \partial \rho E + \rho (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \mathcal{Z} \\ &= [rT + \varkappa(e_c - e_s)] \partial \rho - \varkappa u_i \partial \rho u_i + \varkappa \partial \rho E + \rho (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \rho \mathcal{Z} + (\varkappa e_s - rT) \partial \rho \\ &= \varkappa e_c \partial \rho - \varkappa u_i \partial \rho u_i + \varkappa \partial \rho E + (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \rho \mathcal{Z}.\end{aligned}\tag{A.35}$$

En utilisant A.35 dans A.28 et A.32, les variations infinitésimales des flux convectifs s'expriment finalement, en fonction des variations infinitésimales des variables conservatives, comme suit :

$$\partial \rho u_k = \partial \rho u_k ;\tag{A.36}$$

$$\begin{aligned}\partial \rho u_j u_k + \delta_{jk} \partial P &= (\delta_{jk} \varkappa e_c - u_j u_k) \partial \rho + u_j \partial \rho u_k + u_k \partial \rho u_j - \delta_{jk} \varkappa u_i \partial \rho u_i \\ &\quad + \delta_{jk} \varkappa \partial \rho E + \delta_{jk} (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \rho \mathcal{Z} ;\end{aligned}\tag{A.37}$$

$$\begin{aligned}\partial (\rho E + P) u_k &= u_k \left(\varkappa e_c - E - \frac{P}{\rho} \right) \partial \rho + \left(E + \frac{P}{\rho} \right) \partial \rho u_k - \varkappa u_k u_i \partial \rho u_i \\ &\quad + \varkappa u_k \partial \rho E + u_k (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{d\mathcal{Z}} \partial \rho \mathcal{Z} ;\end{aligned}\tag{A.38}$$

et

$$\partial \rho u_k \mathcal{Z} = -u_k \mathcal{Z} \partial \rho + \mathcal{Z} \partial \rho u_k + u_k \partial \rho \mathcal{Z}.\tag{A.39}$$

$$\mathbf{J}^1 = \partial \mathbf{F}^1 / \partial \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \varkappa e_c - u_1^2 & 2u_1 - \varkappa u_1 & -\varkappa u_2 & -\varkappa u_3 & \varkappa & (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{dZ} \\ -u_1 u_2 & u_2 & u_1 & 0 & 0 & 0 \\ -u_1 u_3 & u_3 & 0 & u_1 & 0 & 0 \\ u_1 \left(\varkappa e_c - E - \frac{P}{\rho} \right) & E + \frac{P}{\rho} - \varkappa u_1^2 & -\varkappa u_1 u_2 & -\varkappa u_1 u_3 & (\varkappa + 1) u_1 & u_1 (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{dZ} \\ -u_1 Z & Z & 0 & 0 & 0 & u_1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.40})$$

$$\mathbf{J}^2 = \partial \mathbf{F}^2 / \partial \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -u_1 u_2 & u_2 & u_1 & 0 & 0 & 0 \\ \varkappa e_c - u_2^2 & -\varkappa u_1 & 2u_2 - \varkappa u_2 & -\varkappa u_3 & \varkappa & (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{dZ} \\ -u_2 u_3 & 0 & u_3 & u_2 & 0 & 0 \\ u_2 \left(\varkappa e_c - E - \frac{P}{\rho} \right) & -\varkappa u_1 u_2 & E + \frac{P}{\rho} - \varkappa u_2^2 & -\varkappa u_2 u_3 & (\varkappa + 1) u_2 & u_2 (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{dZ} \\ -u_2 Z & 0 & Z & 0 & 0 & u_2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.41})$$

$$\mathbf{J}^3 = \partial \mathbf{F}^3 / \partial \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -u_1 u_3 & u_3 & 0 & u_1 & 0 & 0 \\ -u_2 u_3 & 0 & u_3 & u_2 & 0 & 0 \\ \varkappa e_c - u_3^2 & -\varkappa u_1 & -\varkappa u_2 & 2u_3 - \varkappa u_3 & \varkappa & 0 \\ u_3 \left(\varkappa e_c - E - \frac{P}{\rho} \right) & -\varkappa u_1 u_3 & -\varkappa u_2 u_3 & E + \frac{P}{\rho} - \varkappa u_3^2 & (\varkappa + 1) u_3 & u_3 (T + \varkappa T_{ref}) \frac{dr}{dZ} \\ -u_3 Z & 0 & 0 & Z & 0 & u_3 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.42})$$

Les coefficients de la matrice $\mathcal{F}^k = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{J}^k \mathbf{P}$ apparaissant dans le membre de gauche de l'équation vectorielle A.15 peuvent maintenant être calculés :

$$\mathcal{F}^k = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{J}^k \mathbf{P} = \begin{pmatrix} u_k & \delta_{1k}\rho & \delta_{2k}\rho & \delta_{3k}\rho & 0 & 0 \\ 0 & u_k & 0 & 0 & \delta_{1k}/\rho & 0 \\ 0 & 0 & u_k & 0 & \delta_{2k}/\rho & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_k & \delta_{3k}/\rho & 0 \\ 0 & \delta_{1k}\gamma P & \delta_{2k}\gamma P & \delta_{3k}\gamma P & u_k & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_k \end{pmatrix}, \quad (\text{A.43})$$

Remarque : la prise en compte, ou non, de variations spatiales et temporelles de c_v et c_p ne change pas les coefficients de la matrice \mathcal{F}^k .

La forme caractéristique de l'équation A.15 est obtenue après la diagonalisation de \mathcal{F}^k . La matrice diagonale des valeur propres de \mathcal{F}^k , notée Λ^k , est telle que

$$\mathcal{F}^k = \mathbf{S}_k \Lambda^k \mathbf{S}_k^{-1}, \quad (\text{A.44})$$

et permet de réécrire A.15 comme

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathbf{S}_k \Lambda^k \mathbf{S}_k^{-1} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_k} + \mathbf{P}^{-1} \frac{\partial \mathbf{F}_D^k}{\partial x_k} = \mathbf{0}, \quad (\text{A.45})$$

avec :

$$\Lambda^k = \begin{pmatrix} u_k - a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_k & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_k & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_k & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_k + a & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_k \end{pmatrix}, \quad (\text{A.46})$$

$$\mathbf{S}_k = \begin{pmatrix} 1/(2a^2) & \delta_{1k}/a^2 & \delta_{2k}/a^2 & \delta_{3k}/a^2 & 1/(2a^2) & 0 \\ -\delta_{1k}/(2\rho a) & 1 - \delta_{1k} & 0 & 0 & \delta_{1k}/(2\rho a) & 0 \\ -\delta_{2k}/(2\rho a) & 0 & 1 - \delta_{2k} & 0 & \delta_{2k}/(2\rho a) & 0 \\ -\delta_{3k}/(2\rho a) & 0 & 0 & 1 - \delta_{3k} & \delta_{3k}/(2\rho a) & 0 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.47})$$

et

$$\mathbf{S}_k^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -\delta_{1k}\rho a & -\delta_{2k}\rho a & -\delta_{3k}\rho a & 1 & 0 \\ \delta_{1k}a^2 & 1 - \delta_{1k} & 0 & 0 & -\delta_{1k} & 0 \\ \delta_{2k}a^2 & 0 & 1 - \delta_{2k} & 0 & -\delta_{2k} & 0 \\ \delta_{3k}a^2 & 0 & 0 & 1 - \delta_{3k} & -\delta_{3k} & 0 \\ 0 & \delta_{1k}\rho a & \delta_{2k}\rho a & \delta_{3k}\rho a & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.48})$$

A cette étape, l'équation vectorielle de conservation A.12 a été traduite dans le formalisme des ondes caractéristiques, qui se prête beaucoup plus facilement aux traitements des conditions aux limites. Pour simplifier l'écriture, on suppose dans la suite que l'entrée est perpendiculaire à la direction x_1 . L'équation A.45 devient alors

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathbf{S}_1 \mathbf{\Lambda}^1 \mathbf{S}_1^{-1} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_1} + \mathcal{F}^2 \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_2} + \mathcal{F}^3 \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_3} + \mathbf{P}^{-1} \frac{\partial \mathbf{F}_D^k}{\partial x_k} = \mathbf{0}. \quad (\text{A.49})$$

Suivant la méthode de Thompson [117], on introduit le vecteur \mathcal{L} , tel que

$$\mathcal{L} = \mathbf{\Lambda}^1 \mathbf{S}_1^{-1} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_1}. \quad (\text{A.50})$$

Les composantes \mathcal{L}_i de ce vecteur sont associées aux perturbations :

- entropiques, se propageant à une vitesse u_1 (\mathcal{L}_2);
- tourbillonnaires, se propageant également à une vitesse u_1 (\mathcal{L}_3 et \mathcal{L}_4);
- acoustiques progressives, se propageant à une vitesse $u_1 + a$ (\mathcal{L}_5);
- acoustiques rétrogrades, se propageant à une vitesse $u_1 - a$ (\mathcal{L}_1);
- des scalaires actifs ou passifs, se propageant à une vitesse u_1 (\mathcal{L}_6);

et sont telles que

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} (u_1 - a) \left(\frac{\partial P}{\partial x_1} - \rho a \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \\ u_1 \left(a^2 \frac{\partial \rho}{\partial x_1} - \frac{\partial P}{\partial x_1} \right) \\ u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \\ u_1 \frac{\partial u_3}{\partial x_1} \\ (u_1 + a) \left(\frac{\partial P}{\partial x_1} + \rho a \frac{\partial u_1}{\partial x_1} \right) \\ u_1 \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial x_1} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.51})$$

On note \mathbf{d} le vecteur tel que

$$\mathbf{d} = \mathbf{S}_1 \mathcal{L} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right] \\ \frac{1}{2\rho a} (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1) \\ \mathcal{L}_3 \\ \mathcal{L}_4 \\ \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \\ \mathcal{L}_6 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.52})$$

et l'équation A.49 devient

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathbf{d} + \mathcal{F}^2 \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_2} + \mathcal{F}^3 \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_3} + \mathbf{P}^{-1} \frac{\partial \mathbf{F}_D^k}{\partial x_k} = \mathbf{0}. \quad (\text{A.53})$$

Le passage des variables primitives aux grandeurs conservatives s'effectue en multipliant l'équation A.53 par la matrice jacobienne \mathbf{P} ,

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathbf{P} \mathbf{d} + \frac{\partial \mathbf{F}^2}{\partial x_2} + \frac{\partial \mathbf{F}^3}{\partial x_3} + \frac{\partial \mathbf{F}_D^k}{\partial x_k} = \mathbf{0}, \quad (\text{A.54})$$

avec

$$\mathbf{P}\mathbf{d} = \begin{pmatrix} d_1 \\ u_1 d_1 + \rho d_2 \\ u_2 d_1 + \rho d_3 \\ u_3 d_1 + \rho d_4 \\ (e_s + e_c - \frac{rT}{\alpha}) d_1 + \rho u_i d_{i+1} + \frac{d_5}{\alpha} + \rho \left(-\frac{T}{\alpha} - T_{ref}\right) \frac{dr}{dZ} d_6 \\ \mathcal{Z} d_1 + \rho d_6 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.55})$$

On doit prescrire l'amplitude des perturbations entrantes. Selon l'approche adoptée initialement dans [105], les termes diffusifs et visqueux, ainsi que les termes convectifs transverses, sont négligés dans l'équation vectorielle A.53,

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{d} = 0. \quad (\text{A.56})$$

En exprimant chaque composante de A.56, on obtient le système LODI (*Locally One-Dimensional and Inviscid assumption*),

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{a^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right] = 0 \\ \frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{1}{2\rho a} (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1) = 0 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \mathcal{L}_3 = 0 \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} + \mathcal{L}_4 = 0 \\ \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{2} (\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) = 0 \\ \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial t} + \mathcal{L}_6 = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.57})$$

Comme signalé dans la sous-section 3.3.2.1, lorsque d'importantes fluctuations transverses existent au niveau des limites, une approche monodimensionnelle ne suffit pas à contourner complètement le problème des oscillations numériques induites par la prescription des conditions aux limites en compressible. C'est pourquoi, Lodato *et al.* [72] proposent d'introduire, dans le système LODI A.57, une correction permettant de prendre en compte les termes transverses, toujours en négligeant les termes visqueux et diffusifs, aboutissant ainsi à l'équation vectorielle

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{d} - \mathcal{T} = 0, \quad (\text{A.58})$$

dont les composantes s'expriment

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{a^2} \left[\mathcal{L}_2 + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) \right] - \mathcal{T}_1 = 0 \\ \frac{\partial u_1}{\partial t} + \frac{1}{2\rho a} (\mathcal{L}_5 - \mathcal{L}_1) - \mathcal{T}_2 = 0 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \mathcal{L}_3 - \mathcal{T}_3 = 0 \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} + \mathcal{L}_4 - \mathcal{T}_4 = 0 \\ \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{1}{2}(\mathcal{L}_5 + \mathcal{L}_1) - \mathcal{T}_5 = 0 \\ \frac{\partial Z}{\partial t} + \mathcal{L}_{6l} - \mathcal{T}_{6l} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.59})$$

Le vecteur \mathcal{T} rassemble les termes transverses selon les directions x_2 et x_3 :

$$\mathcal{T} = -\mathcal{F}^t \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x_t} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial \rho u_t}{\partial x_t} \\ -u_t \frac{\partial \rho u_1}{\partial x_t} \\ -u_t \frac{\partial \rho u_2}{\partial x_t} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_2} \\ -u_t \frac{\partial \rho u_3}{\partial x_t} - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_3} \\ -u_t \frac{\partial P}{\partial x_t} - \gamma P \frac{\partial u_t}{\partial x_t} \\ -u_t \frac{\partial Z}{\partial x_t} \end{pmatrix}, \quad \text{avec } t = 2, 3. \quad (\text{A.60})$$

En multipliant l'équation A.58 par la matrice \mathcal{S}_1^{-1} et en remplaçant le vecteur \mathbf{d} par son expression dans A.52, les variations des amplitudes des ondes transverses sont reliées aux dérivées temporelles des variables primitives,

$$\mathcal{S}_1^{-1} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathcal{L} - \mathfrak{T}^1 = 0, \quad (\text{A.61})$$

où $\mathfrak{T}^1 = \mathcal{S}_1^{-1} \mathcal{T}$. Les composantes de l'équation A.61 s'écrivent

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\partial P}{\partial t} - \rho a \frac{\partial u_1}{\partial t} \right) + \mathcal{L}_1 - \mathfrak{T}_1^1 = 0 \\ \left(a^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{\partial P}{\partial t} \right) + \mathcal{L}_2 - \mathfrak{T}_2^1 = 0 \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \mathcal{L}_3 - \mathfrak{T}_3^1 = 0 \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} + \mathcal{L}_3 + \mathcal{L}_4 - \mathfrak{T}_4^1 = 0 \\ \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \rho a \frac{\partial u_1}{\partial t} \right) + \mathcal{L}_5 - \mathfrak{T}_5^1 = 0 \\ \frac{\partial Z}{\partial t} + \mathcal{L}_6 - \mathfrak{T}_6^1 = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.62})$$

où \mathfrak{T}_k^m est la $k^{\text{ième}}$ caractéristique, dans une direction x_m perpendiculaire à la direction x_1 ($m=2,3$), qui

est elle-même perpendiculaire au plan limite. Les composantes de \mathfrak{T}^1 s'écrivent

$$\mathfrak{T}^1 = \begin{pmatrix} \mathcal{T}_5 - \rho a \mathcal{T}_2 \\ a^2 \mathcal{T}_1 - \mathcal{T}_5 \\ \mathcal{T}_3 \\ \mathcal{T}_4 \\ \mathcal{T}_5 + \rho a \mathcal{T}_2 \\ \mathcal{T}_6 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.63})$$

Les composantes du vecteur \mathcal{L} sortant du domaine de calcul peuvent être calculées à partir des données disponibles sur le maillage. De plus, grâce au système A.62, celles qui entrent dans le domaine peuvent être calculées à partir des variations temporelles des variables primitives, correspondant aux conditions aux limites physiques. Celles-ci sont généralement définies comme des relaxations, à des vitesses déterminées par l'utilisateur par l'intermédiaire de coefficient, vers des valeurs cibles. Des coefficients élevés correspondent à des relaxations rapides, les cas limite de coefficients infinis revenant à prescrire des conditions aux limites rigides, avec toutes les distorsions numériques que cela entend. Dans le paragraphe suivant, le formalisme général obtenu ci-dessus est appliqué au traitement des conditions limites d'entrée non-réfléchissante en subsonique.

Application au cas d'une entrée non-réfléchissante subsonique

Si le domaine de calcul est situé à droite (*resp.* à gauche) du plan d'entrée considéré, les caractéristiques associées à $\mathcal{L}_2, \mathcal{L}_3, \mathcal{L}_4, \mathcal{L}_6$ et \mathcal{L}_5 (*resp.* à $\mathcal{L}_2, \mathcal{L}_3, \mathcal{L}_4, \mathcal{L}_6$ et \mathcal{L}_1) entrent dans le domaine et donc, 5 conditions aux limites sont nécessaires à la fermeture du problème. La stratégie proposée dans [132] a été adoptée et mise en oeuvre numériquement dans SiTCom ; la contribution des termes transverses selon la méthode NSCBC-3D proposée dans [72] est prise en compte ici. Les trois composantes u_i de la vitesse, la température T ainsi que la fraction de mélange \mathcal{Z} sont imposées,

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial P}{\partial t} + \rho a \frac{\partial u_1}{\partial t} \right) + \eta_5 \frac{\rho a^2 (1 - M_{max}^2)}{L_x} \Delta u_1 + \mathfrak{T}_5^1 &= 0, \\ \left(a^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} - \frac{\partial P}{\partial t} \right) + \eta_2 \frac{\rho a \mathcal{R}}{L_x \bar{W}} \Delta T + \mathfrak{T}_2^1 &= 0, \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \eta_3 \frac{a}{L_x} \Delta u_2 + \mathfrak{T}_3^1 &= 0, \\ \frac{\partial u_3}{\partial t} + \eta_4 \frac{a}{L_x} \Delta u_3 + \mathfrak{T}_4^1 &= 0, \\ \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial t} + \eta_6 \frac{a}{L_x} \Delta \mathcal{Z} + \mathfrak{T}_6^1 &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.64})$$

$$(\text{A.65})$$

où η_2, \dots, η_5 représentent des coefficients de relaxation. Comme dans les études numériques menées dans le chapitre précédent, la valeur des coefficients utilisés est plus élevée que celle suggérée dans [132]. De cette manière, même si l'on rigidifie le système, on n'autorise pas de fortes dérives autour des valeurs cibles, de façon à pouvoir maintenir les conditions d'admission nécessaires à la reproduction des conditions observées expérimentalement dans la MCR.

$$\eta_3 = \eta_4 = \eta_6 = 3, 28$$

$$\eta_2 = \eta_5 = -9, 28$$

$\Delta u_k = u_k - u_k^*$, $\Delta T = T - T^*$, $\Delta \mathcal{Z} = \mathcal{Z} - \mathcal{Z}^*$ représentent respectivement les écarts entre les valeurs des composantes de vitesse, de la température et la fraction de mélange au niveau des mailles adjacentes aux entrées. Les valeurs cibles sont identifiées par l'exposant $*$.

Remarque : dans le chapitre précédent, on avait montré que dans des conditions isentropiques, \mathcal{L}_2 pouvait s'écrire (sans faire apparaître la correction pour les contributions transverses) $\mathcal{L}_2 = \eta_2 P a / \ell_x \log \left[(P/P_0)^{1-\gamma} (T/T_0)^\gamma \right]$, avec P_0 et T_0 , respectivement la pression initiale et la température initiale. Il n'y avait donc aucune température cible à imposer. Ici (toujours sans les termes transverses), $\mathcal{L}_2 = \eta_2 \rho a \mathcal{R} / (L_x \overline{W}) \Delta T$ et la fermeture des conditions aux limites pour l'onde entropique nécessite la prescription d'une température cible T^* . Pour déterminer T^* , une méthode a été proposée ; elle est décrite dans la sous-section suivante.

A.3.3 Test numérique de la méthode NSCBC-3D couplée à la tabulation de la thermodynamique, en 2D

Sans prendre en compte les corrections du formalisme NSCBC-3D intégrant les variations spatiales et temporelles de c_p , c_v et donc de γ , une dérive de la température par rapport à sa valeur cible était observée. Ce problème est particulièrement marqué dans les zones situées dans le voisinage des coins, où la composante normale de la vitesse que l'on impose est très faible (*c.f.* profil 4 sur la figure 5.3, à un rayon proche de $D_{cc}/2 = 0.02\text{m}$).

Ainsi, pour une simulation numérique directe où le profil d'admission est laminaire (*i.e.* on ne sur-impose pas de signal turbulent corrélé, au profil de vitesse cible dans la direction normale au plan d'admission), et où aucune fluctuation de \mathcal{Z} , ni de température, n'est imposée ($\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{st}$ et $T^* = 405\text{ K}$), on montre un agrandissement du champ de température au voisinage du plan d'admission. On observe une dérive du comportement des conditions aux limites dans le cas où la correction nécessitée par la prise en compte des inhomogénéités des coefficients calorifiques est négligée (image de gauche sur la figure A.3). Compte-tenu de l'extrême sensibilité du phénomène d'auto-allumage à la température, il est évident que cet artefact numérique doit être évité. Après adaptation du formalisme NSCBC-3D, ces perturbations numériques sont entièrement éliminées (image de droite sur la figure A.3).

Pour tester cette extension de la méthode NSCBC-3D à c_p et c_v variables, couplée à la stratégie de tabulation de la thermochimie décrite précédemment, la simulation numérique directe d'un cas 2D simple de compression en laminaire est mise en oeuvre :

- la composante normale de vitesse au plan d'admission U^* est déterminée selon la méthode proposée dans la sous-section 5.2.3. Les autres composantes sont imposées à 0 ;
- le profil d'admission de la fraction de mélange cible \mathcal{Z}^* est une sinusoïde de période $D_{cc}/2.5$ et d'amplitude 0.0126 ;
- la température cible d'admission T^* est définie de façon à être toujours inférieure à la température de compression adiabatique, pour générer des flux thermiques significatifs dans la chambre de combustion.

Les résultats du calcul à un instant arbitraire où l'écoulement s'est suffisamment développé dans la chambre de combustion de la MCR, sont présentés sur la figure A.4.

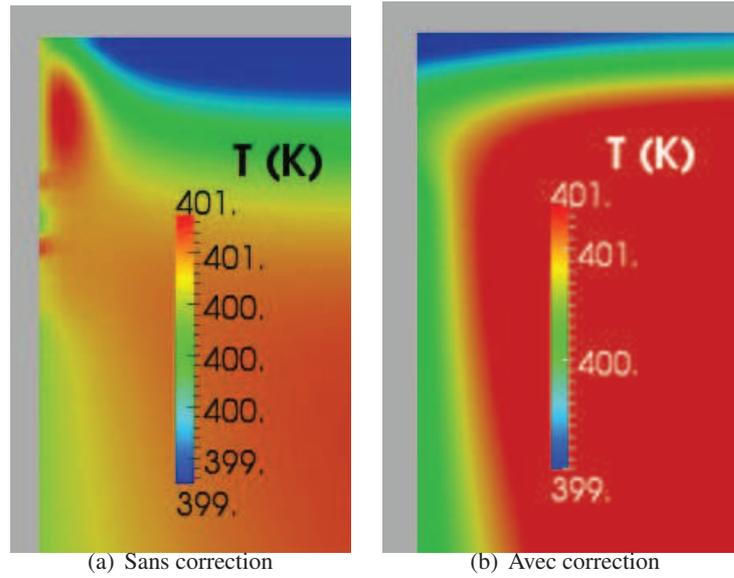


FIGURE A.3 – Champ de température issu d’un cas 2D laminaire, au voisinage du plan d’admission (côté gauche). A gauche, NSCBC-3D sans correction pour la prise en compte de c_p et c_v variables. A droite, avec correction.

Les champs physiques restent symétriques par rapport à l’axe de la chambre de combustion, conformément aux conditions aux limites imposées ; les nouvelles conditions aux limites n’introduisent aucune perturbation numérique qui pourrait déstabiliser artificiellement l’écoulement. En outre, aucune distorsion n’est produite au niveau du plan d’admission, comme l’atteste le champ de pression, dont les fluctuations, d’amplitude très faibles, résultent uniquement de la dynamique de l’aérodynamique.

A.3.3.1 Modélisation de la température de compression non-isentropique

On suppose que le volume de la chambre de pré-compression (*c.f.* figure 5.1) se comporte comme un réacteur homogène subissant la compression volumétrique imposée par le piston, ainsi que des pertes thermiques. La température cible T^* prescrite au cours du temps sur le plan d’admission est assimilée à celle de ce réacteur ; on la détermine de la manière présentée ci-dessous.

La loi des gaz parfait est tout d’abord écrite sous la forme

$$PV = n\mathcal{R}T, \quad (\text{A.66})$$

où V désigne le volume et n le nombre de moles de gaz présent dans V . Pour un gaz parfait inerte, l’énergie interne u n’est fonction que de la température et on peut écrire que

$$du = c_v dT. \quad (\text{A.67})$$

De plus, la première loi de la thermodynamique permet d’écrire que

$$\delta Q = c_v dT + PdV. \quad (\text{A.68})$$

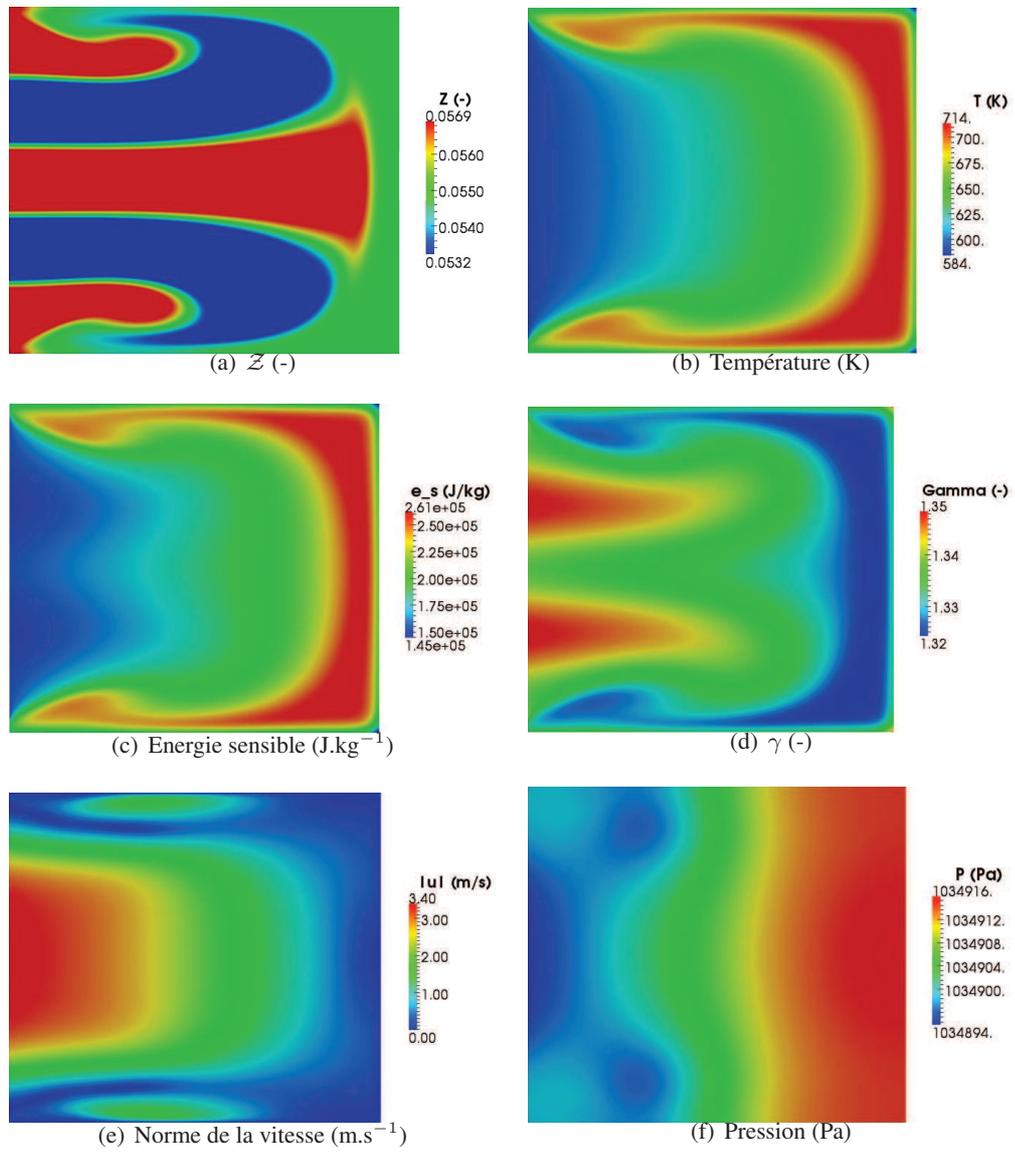


FIGURE A.4 – Champs instantanés issus d'un calcul 2D laminaire ; test des conditions aux limites.

où δQ correspond à la chaleur échangée entre le système considéré et l'extérieur. Comme le gaz dans la chambre de combustion (*c.f.* sous-section 5.2.1), le gaz contenu dans la chambre de pré-compression subit des pertes thermiques telles que

$$\delta Q = -hS_{pc}(T - T_{out})\delta t, \quad (\text{A.69})$$

où $S_{pc} = \pi D_p^2/2 - \pi D_{cc}^2/4 + \pi D_p x_p$ est la surface délimitant le volume de la chambre de pré-compression ; la surface $S_{cc} = \pi D_{cc}^2/4$ du plan d'admission ne participe pas aux échanges thermiques avec l'extérieur et est, par conséquent, retirée de la surface totale. En utilisant l'égalité A.69 dans l'équation A.68, on obtient que

$$dT = \frac{1}{c_v} (-hS_{pc}(T - T_{out})\delta t - PdV). \quad (\text{A.70})$$

Or,

$$\begin{aligned} c_p dT &= c_v dT + PdV + VdP \\ &= -hS_{pc}(T - T_{out})\delta t + VdP, \end{aligned} \quad (\text{A.71})$$

ce qui, une fois injecté dans l'équation A.70, donne

$$\gamma(-hS_{pc}(T - T_{out})\delta t - PdV) = -hS_{pc}(T - T_{out})\delta t + VdP; \quad (\text{A.72})$$

on divise à gauche et à droite par PV ,

$$\gamma \left(-\frac{hS_{pc}}{PV}(T - T_{out})\delta t - \frac{dV}{V} \right) = -\frac{hS_{pc}}{PV}(T - T_{out})\delta t + \frac{dP}{P}. \quad (\text{A.73})$$

Pour un volume fermé, sans échange de masse avec l'extérieur, n est constant durant la transformation, ce qui permet d'obtenir que

$$\frac{dP}{P} = \frac{dT}{T} - \frac{dV}{V}. \quad (\text{A.74})$$

En utilisant cette relation dans l'équation A.73, il vient, après manipulations, que

$$(\gamma - 1) \frac{dV}{V} + \frac{dT}{T} + (\gamma - 1) \frac{hS_{pc}}{PV}(T - T_{out})\delta t = 0, \quad (\text{A.75})$$

que l'on peut réécrire

$$dT = -(\gamma - 1)T \left(\frac{dV}{V} + \frac{hS_{pc}}{n\mathcal{R}} \left(1 - \frac{T_{out}}{T} \right) \delta t \right), \quad (\text{A.76})$$

où $n\mathcal{R}$ est constant. On prend donc $n\mathcal{R} = P_0 V_0 / T_0$. L'équation A.76 est discrétisée à l'aide d'un schéma d'Euler explicite, et l'expression de S_{pc} est explicitée, pour aboutir finalement à

$$T^{n+1} = T^n \left[1 - (\gamma^n - 1) \left(\frac{\Delta V^n}{V^n} + \frac{hT_0(\pi D_p^2/2 - \pi D_{cc}^2/4 + \pi D_p x_p^n)}{P_0 V_0} \left(1 - \frac{T_{out}}{T^n} \right) \delta t \right) \right], \quad (\text{A.77})$$

où γ^n est calculé à T^n et \mathcal{Z}_{st} .

Remarque : pour $h=0\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$, on obtient l'évolution de la température dans un réacteur homogène adiabatique dont le volume est fonction du temps.

Sur la figure A.5, on présente l'évolution en fonction du temps adimensionné, de la vitesse du piston (trait noir pointillé), de U_o^* , la vitesse débitante cible calculée à partir de la vitesse du piston selon la relation 5.21 (trait noir plein), et de U_o , celle effectivement prescrite par l'intermédiaire de l'approche NSCBC-3D, dans un cas 2D laminaire, sans fluctuation de fraction de mélange (trait rouge plein), pour $Z = Z_{st}$ et $h=0\text{W.m}^{-2}.\text{K}^{-1}$.

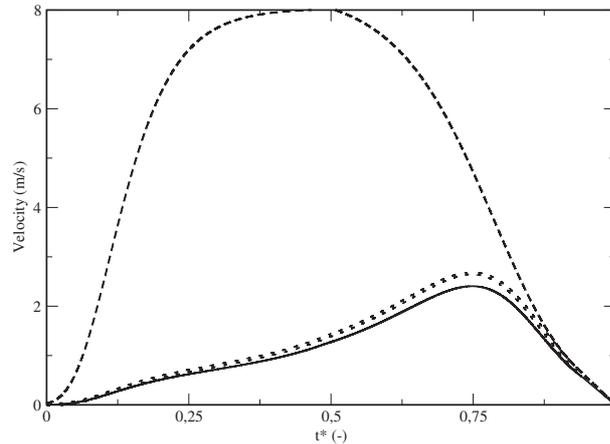


FIGURE A.5 – Evolution en fonction du temps, des vitesses caractérisant la compression volumétrique. Trait noir pointillé : vitesse du piston. Trait rouge plein : U_o^* , la vitesse débitante cible calculée *via* la relation 5.21. Trait noir plein : vitesse débitante U_o effectivement prescrite par l'intermédiaire de l'approche NSCBC-3D, dans un cas 2D laminaire, sans fluctuation de fraction de mélange ($Z = Z_{st}$).

A cause d'un effet de relaxation inhérent à l'approche NSCBC, $U_o < U_o^*$, la quantité de gaz admis dans la chambre de combustion durant la phase de compression est sous-estimée, avec, comme conséquence, la sous-estimation de P et T par rapport au calcul 0D à volume fonction du temps, effectué avec le code Cantera, comme le montre la figure A.6. De la même manière que dans l'étude numérique menée dans le chapitre 5 (*c.f.* sous-section 5.2.4.1), on peut affecter à U_o un coefficient permettant de corriger ce biais.

A.4 Perspectives : tabulation de la thermochimie durant la phase de combustion à volume constant

Avant le point mort haut, l'écoulement est considéré comme inerte et les tables thermodynamiques ne présentent que deux entrées (Z, e_s) ou (Z, T), où T et e_s sont équivalents respectivement à la température T_0 des gaz frais et à leur pression P_0 . Grâce à cette hypothèse d'écoulement inerte durant la phase de compression, validée dans la figure A.1 pour les conditions initiales présentées dans la table A.1, le stockage des tables ne nécessite que très peu de mémoire. Si l'on avait dû inclure la description des processus chimiques par la tabulation de réacteurs homogènes, deux entrées supplémentaires auraient été nécessaires. En effet, l'état thermochimique d'un réacteur est entièrement déterminé par la connaissance de Y_c , Z et les conditions thermodynamiques des gaz frais (*i.e* à $Y_c = 0$) représentées par le couple (P_0, T_0) . En considérant que le mélange est inerte jusqu'au point mort haut, on s'économise le stockage

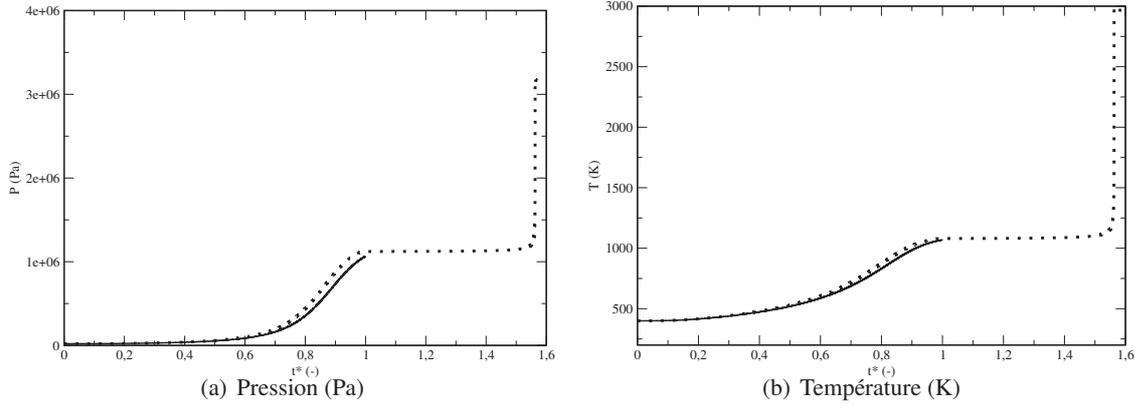


FIGURE A.6 – Comparaison des évolutions de la thermodynamique dans la chambre de combustion. Noir : moyenne spatiale de la DNS 2D laminaire. Rouge : réponse 0D, calcul Cantera pour un volume fonction du temps.

selon les directions Y_c et P_0 . De plus, au cours de la compression, la thermodynamique des gaz frais est fortement impactée (d'après la figure A.1, $P_0 \in [0.2\text{atm}, 1.2\text{atm}]$ et $T_0 \in [400\text{K}, 1100\text{K}]$). Or, les tables devant être générées sur toute la gamme de variation, leur taille devient rapidement très importante et un facteur limitant dans la simulation.

A.4.1 Implantation des tables thermochimiques de réacteurs homogènes

A.4.1.1 Raccord entre les tables en inerte et les tables en réactif

Tout d'abord, on doit s'assurer que le raccord entre les tables en inerte (phase de compression) et les tables en réactif (phase de combustion à volume constant) s'effectue correctement, notamment au niveau de l'énergie sensible. Pour une tabulation de type FPI, selon la section 4.4.4.3, le vecteur des paramètres de contrôle s'écrit $\Psi = (c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)^T$. Dans ce qui suit, les quantités pour lesquelles l'exposant FPI est précisé sont extraites des tables réactive FPI ; celles identifiées par l'exposant u sont, quant à elles, extraites des tables thermodynamiques inertes (*c.f.* sous-section A.3.1). La relation 3.14 peut s'écrire sous la forme

$$\begin{aligned}
 e_s &= e_s^{FPI}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0) \\
 &= \int_{T_{ref}}^{T^{FPI}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)} c_v(T') dT' - \frac{\mathcal{R}T_{ref}}{\bar{W}^{FPI}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)} \\
 &= \int_{T_{ref}}^{T_0} c_v(T') dT' + \int_{T_0}^{T^{FPI}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)} c_v(T') dT' - \frac{\mathcal{R}T_{ref}}{\bar{W}^{FPI}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)} \\
 &= e_s^u(\mathcal{Z}, T_0) + \frac{\mathcal{R}T_{ref}}{\bar{W}^u(\mathcal{Z})} + \int_{T_0}^{T^{FPI}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)} c_v(T') dT' \\
 &\quad - \frac{\mathcal{R}T_{ref}}{\bar{W}^{FPI}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)}. \tag{A.78}
 \end{aligned}$$

Remarque : pour $c = 0$, on a bien $\overline{W}^{FPI}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0) = \overline{W}^u(\mathcal{Z})$, ce qui est essentiel pour assurer un raccord rigoureux entre les deux tables : $e_s^{FPI}(c = 0, \mathcal{Z}, P_0, T_0) = e_s^u(\mathcal{Z}, T_0)$.

A.4.1.2 Détermination des conditions thermodynamiques des gaz frais (P_0, T_0)

Y_c et \mathcal{Z} sont donc transportés dans le solveur SiTCom et sont connus en chaque point du maillage. Pour extraire de la table le vecteur d'état $\Psi = \Psi^{Tab}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)$, il reste à déterminer P_0 et T_0 , de façon consistante avec l'approche de tabulation de PSR. Deux types de réponses de réacteurs fermés (sans échange de masse ni de chaleur) sont généralement utilisés pour modéliser la thermochimie dans la maille : ils sont caractérisés par une condition thermodynamique supplémentaire de volume constant ou de pression constante. La stratégie décrite dans ce qui suit pour déterminer (P_0, T_0) s'inspire de celle proposée, pour des réacteurs homogènes à volume constant, par Subramanian [112]. Elle est ici adaptée au cas où la composition du mélange est suivie par la fraction de mélange \mathcal{Z} . Le cas des réacteurs homogènes à pression constante est également présenté.

– Cas des réacteurs homogènes à volume constant :

Dans cette configuration de réacteur, la masse volumique est constant au cours de la réaction (elle est notée ρ^*) et est directement extraite de l'intégration de l'équation de continuité par le solveur SiTCom au point considéré du maillage,

$$\rho^* = \rho^{SiT}(\mathbf{x}, t). \quad (\text{A.79})$$

Dans les gaz frais, la masse molaire du mélange n'est fonction que de \mathcal{Z} et est connue, \mathcal{Z} étant transporté. La loi des gaz parfait permet donc de relier la pression et la température initiale,

$$P_0 = \rho^* r_0(\mathcal{Z}) T_0 = \beta T_0. \quad (\text{A.80})$$

De plus, on montre facilement que dans ce type de réacteur, l'énergie interne est conservée (elle est notée e_i^*), ce qui permet d'écrire que

$$e_i^* = e_s + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k = e_s^0 + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k^0. \quad (\text{A.81})$$

L'énergie sensible e_s peut être déterminée à partir de l'énergie totale non-chimique transportée dans SiTCom, et $\Delta h_{f,k}^0 Y_k^0$, fonction uniquement de \mathcal{Z} dans les gaz frais, peut également être extrait des tables. On réécrit la relation A.81 de façon équivalente comme

$$\sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k - e_s^0 - K_v = 0, \quad (\text{A.82})$$

avec $K_v = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k^0 - e_s$ connu.

En notant $\Delta H_f(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0) = \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k$, en remarquant que e_s^0 n'est fonction que de (\mathcal{Z}, T_0) et en utilisant la relation A.80, l'équation A.82 devient,

$$\Delta H_f(c, \mathcal{Z}, \beta T_0, T_0) - e_s^0(\mathcal{Z}, T_0) - K_v = 0. \quad (\text{A.83})$$

Il convient de souligner que, dans le solveur SiTCom, on transporte Y_c , et pas c^2 , qui reste donc à déterminer pour extraire les informations de la table. On fait l'hypothèse que $Y_c^{eq} = Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq} + Y_{H_2O}^{eq}$ est beaucoup plus sensible à la composition initiale, et donc à \mathcal{Z} , qu'aux conditions thermodynamiques initiales (P_0, T_0) . On montre sur la figure A.7 les évolutions de Y_c^{eq} en fonction de T_0 et P_0 , pour $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{st}$ à gauche et en fonction de \mathcal{Z} , pour $P_0 = 10.10^5$ Pa et $T_0 = 1000$ K pour les réacteurs homogènes à volume constant en rouge, et à pression constante en noir. Ainsi, l'estimation de Y_c^{eq} peut être faite pour un \mathcal{Z} calculé au pas de temps courant et pour un couple (P_0, T_0) calculé au pas de temps précédent. On doit donc tabuler ΔH_f en fonction du vecteur d'entrée $(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)$, e_s^0 , en fonction de (\mathcal{Z}, T_0) et r_0 , en fonction de \mathcal{Z} , avant le calcul CDF. Pendant, pour déterminer le T_0 vérifiant l'équation A.83, on utilise une méthode de Newton ; ΔH_f et e_s^0 sont alors nécessaires, et accessibles dans les tables. En général, il a été observé qu'il existait plusieurs solutions satisfaisant A.83 ; cependant, en l'initialisant à une valeur T_0 suffisamment proche de la solution attendue, la méthode de Newton converge vers la bonne valeur. Par définition, T_0 ne subit pas directement l'effet de la chimie ; son temps caractéristique d'évolution est donc suffisamment long pour qu'une initialisation de la méthode de Newton à la valeur T_0 obtenue à l'itération précédente de SiTCom permette la convergence vers la bonne valeur. P_0 est finalement déterminé en utilisant la relation A.80.

– Cas des réacteurs homogènes à pression constante :

Ici, la pression reste constante au cours de la réaction (elle est notée P^*) et est directement extraite de SiTCom.

$$P^* = P^{SiT}(\mathbf{x}, t). \quad (\text{A.84})$$

Dans cette configuration de réacteur, c'est l'enthalpie (h^*) qui est conservée, ce qui permet d'obtenir que

$$h^* = h_s + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k = h_s^0 + \sum_{k=1}^{N_{sp}} \Delta h_{f,k}^0 Y_k^0. \quad (\text{A.85})$$

Pour être cohérent avec le formalisme adopté dans SiTCom, on écrit h_s en fonction de e_s ,

$$h_s = e_s + \frac{P}{\rho}. \quad (\text{A.86})$$

En utilisant cette relation et les mêmes notations que celles proposées dans le cas du réacteur homogène à volume constant, il est possible d'écrire l'équation A.85 comme suit,

$$\Delta H_f(c, \mathcal{Z}, P^*, T_0) - e_s^0(\mathcal{Z}, T_0) - r_0 T_0 - K_p = 0, \quad (\text{A.87})$$

où $K_p = \Delta H_f(c = 0, \mathcal{Z}, P^*, T_0) - e_s(c, \mathcal{Z}, P^*, T_0) - \frac{P^*}{\rho}$ est connue, $\rho = \rho^{SiT}(\mathbf{x}, t)$ étant la masse volumique calculée par SiTCom au point considéré du maillage.

De la même manière qu'à volume constant, Y_c^{eq} est estimé pour un \mathcal{Z} calculé au pas de temps courant et pour un couple (P_0, T_0) calculé au pas de temps précédent. De plus ΔH_f , e_s^0 et r_0 doivent également être tabulés afin d'être accessibles durant la résolution de l'équation A.87. Enfin, les mêmes précautions doivent être prises à l'initialisation de la méthode de Newton.

2. $c = Y_c / Y_c^{eq}(\mathcal{Z}, P_0, T_0)$

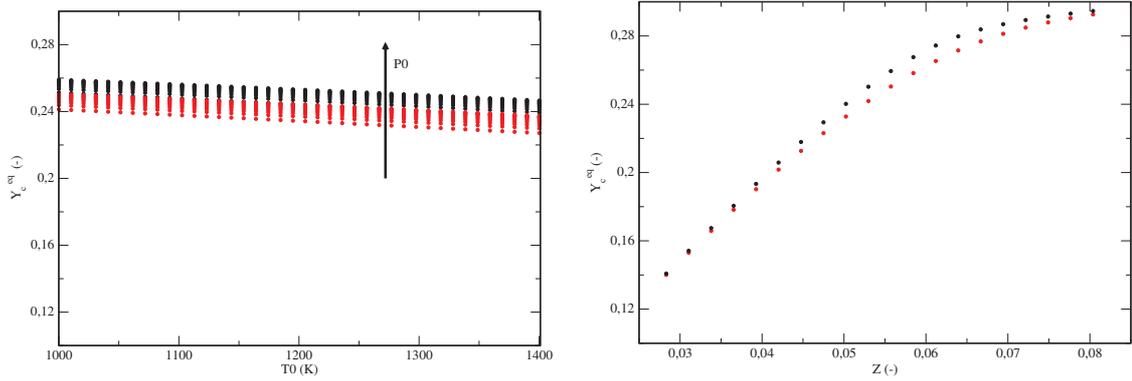


FIGURE A.7 – Réponses de réacteurs homogènes, en noir, à pression constante, et en rouge, à volume constant. A gauche, dépendance de Y_c^{eq} à T_0 ($T_0 \in [1000K, 1400K]$) et P_0 ($P_0 \in [2 \cdot 10^5 Pa, 16 \cdot 10^5 Pa]$), à $Z = Z_{st}$. A droite, dépendance de Y_c^{eq} à Z , pour $P_0 = 10 \cdot 10^5 Pa$ et $T_0 = 1000 K$.

A.4.1.3 Détermination de la valeur de $\dot{\omega}_{Y_c}$ pour $c = 0$

Les hypothèses simplificatrices relatives à l'approche par la tabulation permettent de modéliser toute la dynamique de la cinétique chimique uniquement par l'intermédiaire de Y_c (ou c), Z , qui sont des quantités transportées par SiTCom, et des conditions thermodynamiques des gaz frais, P_0 et T_0 , reconstruites selon la méthode présentée dans la sous-section précédente. En pratique, on a notamment besoin de tabuler le terme source de la variable d'avancement $\dot{\omega}_{Y_c}$, afin d'intégrer l'équation de transport pour Y_c . Un biais est cependant introduit, à ce niveau, par la description selon Y_c .

En effet, conformément à la définition A.1 de la variable d'avancement, son terme source $\dot{\omega}_{Y_c}$ doit être nul en tout début de réaction, *i.e.* pour $Y_c = 0$ et par conséquent, la réaction est gelée définitivement. Il apparaît donc nécessaire d'imposer une valeur non nulle à $\dot{\omega}_{Y_c}$ au premier point de la table (en $Y_c = 0$) afin d'amorcer les processus thermochimiques. Compte tenu de la non-linéarité des équations décrivant le système chimique et donc de la sensibilité aux conditions initiales, une valeur initiale arbitraire de $\dot{\omega}_{Y_c}$ peut mener à des délais d'auto-inflammation totalement aberrants, et compromettre la représentativité des calculs. Subramanian [112] propose l'approximation linéaire suivante pour les i premières valeurs de $\dot{\omega}_{Y_c}$ dans la table (pour la simplicité de l'écriture, Z , P_0 et T_0 sont fixés ici),

$$\dot{\omega}_{Y_c^*} = \frac{Y_c^*(c = c_i) - Y_c^*(c = c_{i-1})}{\tau_i - \tau_{i-1}}, \quad (\text{A.88})$$

où $Y_c^*(c = c_i)$ est la valeur de la variable d'avancement obtenue au temps $t = \tau$ pour lequel $c(\tau) = c_i$. Les différentes valeurs de $\tau_i(Z)$ doivent donc être tabulées.

Une autre méthode est employée ici. Pour garantir que $\dot{\omega}_{Y_c}(c_{i=1} = 0, Z, P_0, T_0)$ permette de retrouver le bon délai d'auto-inflammation $\tau_{ig}(Z, P_0, T_0)$, la stratégie suivante a été développée pour les deux types de réacteurs. Elle est basée sur l'intégration numérique de l'équation

$$\frac{dY_c}{dt} = \dot{\omega}_{Y_c}^{Tab}, \quad (\text{A.89})$$

et utilise l'algorithme de dichotomie suivant :

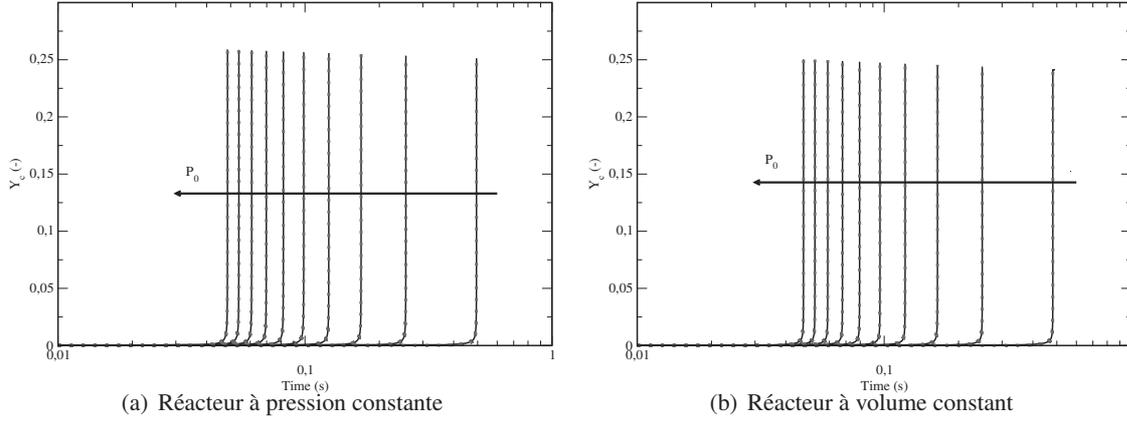


FIGURE A.8 – Evolution de Y_c pour $T_0 = 1000K$ et pour $P_0 \in [1atm, 10atm]$. Traits pleins : réponses issues des calculs Cantera en chimie complexe. Traits pointillés : réponses issues de l'intégration numérique de l'équation A.89, où $\dot{\omega}_{Y_c}^{Tab} = \dot{\omega}_{Y_c}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)$.

1. On se donne un critère permettant de définir $\tau_{ig}(\mathcal{Z}, P_0, T_0)$: il s'agit ici de l'instant où $T(c = c(t), \mathcal{Z}, P_0, T_0) = T_0 + 200K$. Les $\tau_{ig}(\mathcal{Z}, P_0, T_0)$ sont extraits des calculs de Cantera en chimie complexe. A cette étape, les tables sont déjà générées : seuls les points en $c_{i=1} = 0$ sont considérés comme indéterminés.
2. Initialisation : on détermine l'intervalle dans lequel la valeur $\dot{\omega}_{Y_c}(c_{i=1} = 0, \mathcal{Z}, P_0, T_0)$ se situe. En toute logique, on doit avoir :

$$\dot{\omega}_{Y_c}(c_{i=1} = 0, \mathcal{Z}, P_0, T_0) \in [a = 0; b = \dot{\omega}_{Y_c}(c(2), \mathcal{Z}, P_0, T_0)] \quad (A.90)$$

3. On prend $\dot{\omega}_{Y_c}(c_{i=1} = 0, \mathcal{Z}, P_0, T_0) = (a + b)/2$ et on intègre l'équation A.89 en utilisant la table ainsi complétée, jusqu'à ce que la condition $T(c = c(t), \mathcal{Z}, P_0, T_0) = T_0 + 200K$ soit vérifiée ;
4. Si $t - \tau_{ig}(\mathcal{Z}, P_0, T_0) < 0$, on écrase a : $a = (a + b)/2$. Sinon, on écrase b : $b = (a + b)/2$;
5. Tant que $|t - \tau_{ig}(\mathcal{Z}, P_0, T_0)|/\tau_{ig}(\mathcal{Z}, P_0, T_0) > 10^{-6}$, on reprend la procédure à l'étape 3.

La validité de cette stratégie est prouvée dans la figure A.8, où les réponses obtenues en chimie complexe par le code Cantera sont comparées à celles obtenues par l'intégration numérique de l'équation A.89, à gauche, à pression constante, et à droite, à volume constant.

Table des figures

1.1	Cycle théorique de Beau de Rochas dans le plan (P, V)	17
1.2	Cycle théorique de Diesel dans le plan (P, V)	18
1.3	Evolution des puissances de calcul sur les 19 dernières années	21
2.1	Valeur du gradient critique de température initiale, extrait de [46].	27
2.2	Evolutions de la limite inférieure (ξ_l) et supérieure (ξ_u) du domaine de détonation, en fonction du nombre d'excitation $n_e = (r_0/a)/\tau_e$, extrait de [46].	29
2.3	Schéma de la structure d'une flamme triple extrait de [122]	31
2.4	Propagation du noyau d'auto-inflammation par l'intermédiaire des flammes triples	31
2.5	Scatter plots à différents instants durant l'auto-allumage extraits de [110]	35
2.6	Topologies des zones de réaction associées aux moteurs à combustion interne	37
2.7	Visualisation directe des différents sites d'auto-inflammation, Lavy <i>et al.</i> [68]	39
2.8	Coupe longitudinale de la MCR de l'IJLRA de l'UPMC, Keromnes [61]	41
2.9	Configuration géométrique du modèle multi-zone, Komninou <i>et al.</i> [66]	42
2.10	Modèle d'interaction entre le coeur adiabatique et la couche limite thermique, [36]	44
2.11	Visualisation du front de réaction par suivi de l'iso-température $T = 1100K$, [58]	46
3.1	Croquis des tourbillons dans un écoulement turbulent, par Léonard de Vinci	52
3.2	Représentation du spectre de l'énergie cinétique turbulente	60
4.1	Diagramme de Borghi, Destriau et Peters	74
4.2	Principe de la résolution de la chimie par une technique de tabulation	77
4.3	Structure du front de flamme de prémélange laminaire	82
4.4	Structure de la flamme de diffusion	84
4.5	Structure de la flammelette $Y_c - Z$, extraite de [93]	87
4.6	Temperature (K) vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049, \phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769, \phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532, \phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution (PREMIX, not all points are shown).	95
4.7	CH_4 mass fraction vs Y_c . Square : Lean ($Z = 0.1049, \phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769, \phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532, \phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.	96

4.8	CO ₂ mass fraction vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049, \phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769, \phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532, \phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.	97
4.9	CO mass fraction vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049, \phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769, \phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532, \phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.	98
4.10	H ₂ O mass fraction vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049, \phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769, \phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532, \phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.	99
4.11	OH mass fraction vs Y_c , Square : Lean ($Z = 0.1049, \phi = 0.6$). Circle : Stoichiometry ($Z_s = 0.1769, \phi = 1.0$). Triangle : Rich ($Z = 0.2532, \phi = 1.4$). Line : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). Dash-line : Solution neglecting differential diffusion terms. Symbol : physical-space reference solution.	100
4.12	Terms of Eq. (4.37) vs Y_c for CH ₄ mass fraction. Line : Term (i) $\times dY_{CH_4}/dY_c$; Circle : (ii) $\times dY_{CH_4}/dY_c$; Square : (iii) $\times dY_{CH_4}/dY_c$; Dotted : (iv); Triangle-up : (v); Dashed : (vi). Budget : Line $\phi = 0.6$; Dashed $\phi = 1.0$; Dotted-dashed $\phi = 1.4$	101
4.13	Terms of temperature Eq. (4.38) vs Y_c . Line : Term (i) $\times dT/dY_c$; Circle : (ii) $\times dT/dY_c$; Square : (iii) $\times dT/dY_c$; Dotted : (iv) $\times dT/dY_c$; Triangle-up : (v) $\times dT/dY_c$; Dashed : (vi). Dashed-dotted : (vii).	102
4.14	S_L (m/s) versus equivalence ratio. ● : physical-space reference solution. × : Solution of Eqs. (4.37) and (4.38) (IFM). * : Solution neglecting differential diffusion terms.	103
4.15	$\mathcal{E}_i(n_c)$ (Eq. (4.49)) vs number of mesh points. ▼ : CH ₄ ; ● : H ₂ O; ■ : OH; ▲ : CO; ◀ : CO ₂ ; + : H; * : HO ₂ ; ► : C ₂ H ₂ ▲ : Temperature.	103
4.16	Reduction (%) in CPU time relatively to the 80 points reference reduced phase space solution.	104
5.1	Schéma modèle de la MCR simulée [48]. La nature des conditions aux limites utilisées est indiquée. L_{cc}, D_{cc}, V_{cc} : longueur, diamètre et volume de la chambre de combustion. V^* : volume mort. D_p : diamètre du piston. $x_p(t)$: position du piston. $V_p(t)$: volume restant à balayer par le piston. $x^* = x_p(t = t_{TDC})$: position du piston au PMH.	110
5.2	Interpolation à partir des données expérimentales de l'évolution de la vitesse du piston au cours du temps.	111
5.3	Les différents profils F^+ testés. Ligne continue : profil 1 ($f_1 = 20.0, f_2 = 0.300$ et $f_3 = 0.0045$); points : profil 2 ($f_1 = 50.0, f_2 = 0.380$ et $f_3 = 0.0045$); tirets : profil 3 ($f_1 = 8.0, f_2 = 0.300$ et $f_3 = 0.1000$); points+tirets : profil 4 ($f_1 = 9.0, f_2 = 0.355$ et $f_3 = 0.1900$).	115
5.4	Evolution, au cours du temps, jusqu'à l'instant du point mort haut, de la pression moyenne dans la chambre de combustion. ● : expérience; × : LES	116
5.5	Norme de la vitesse ($m.s^{-1}$) présentée sur une coupe transversale de la chambre de combustion, du haut vers le bas à $t = t_{TDC}$ ms, $t = t_{TDC} + 5$ ms, $t = t_{TDC} + 10$ ms et $t = t_{TDC} + 17$ ms.	118

5.6	Evolution, au cours du temps, à partir de l'instant du point mort haut, de l'énergie cinétique moyenne dans la chambre de combustion. PIV - ●. LES - Ligne continue : profil 1 ; points : profil 2 ; tirets : profil 3 ; points+tirets : profil 4.	119
5.7	Champ de scalaire passif présenté sur une coupe longitudinale de la chambre de combustion. En bleu ciel, le mélange est initialement présent dans la chambre de combustion ; en noir, il a injecté durant la phase d'admission.	120
5.8	Iso-contour du critère Q ($Q = 15 \cdot 10^6 \text{ s}^{-2}$) coloré par la température, cas (2). Le plan d'admission est à gauche.	124
5.9	Coupes longitudinales de la pression et de la température. Cas (2), $t^* = 0.94$	125
5.10	Coupe longitudinale de l'intensité des termes de diffusion et de compression/dilatation de l'équation (5.34). Cas (2), $t^* = 0.94$	127
5.11	Critère Q (en s^{-2}) vs divergence de la vitesse (en s^{-1}). Cas (2), $t^* = 0.94$	128
5.12	Coupes transversales du champ de température au niveau des premiers sites d'auto-inflammation. (a) : $x = 0.95 \text{ cm}$. (b) : $x = 0.15 \text{ cm}$	129
5.13	Profils de température passant par les centres des sections de coupe présentées sur la figure 5.12 (position en cm). Ligne pleine : cas (1), coupe horizontale. Ligne pointillée : cas (2) coupe verticale.	130
5.14	Coupe longitudinale de la chambre de combustion. Champs de pression pendant l'auto-allumage dans les deux cas 3D.	130
5.15	Champs issus des simulations 2D. (a) - (b) : terme source chimique dans l'équation (5.34), lignes : iso- Q . (c) - (d) : pression en niveaux de gris, ligne : iso- Q ((c) : $Q = 6 \cdot 10^9 \text{ s}^{-2}$, (d) : $Q = 2 \cdot 10^8 \text{ s}^{-2}$). (e) - (f) : intensité de $\rho\chi_T$ en niveaux de gris, intensité du critère Q en couleurs. Gauche : cas (3) à $t^* = 1.187$. Droite : cas (4) à $t^* = 0.9705$	132
5.16	Illustration du mécanisme de compression local extrait du cas (4). Couleurs : vorticité seuillée, deux tourbillons contrarotatifs. Lignes : lignes de courant . Niveau de gris : intensité des termes de compression/dilatation dans l'équation (5.34) (elle augmente du noir vers le blanc).	133
5.17	Champs de pression des cas 2D. Gauche : cas (3). Droite : cas (4).	134
5.18	Vitesse de déplacement relatif (<i>c.f.</i> équation 5.37) vs vitesse du son (m/s). Cercles : cas (3) at $t^* = 1.1895$. Carrés : cas (4) at $t^* = 0.9710$. Ligne : bissectrice du plan.	135
5.19	Schéma de l'impact de la diffusion de la chaleur sur les zones homogènes de température, résultant en un auto-allumage localisé.	136
5.20	Pour un réacteur homogène à pression constant, réponses des termes du membre de droite de l'équation 5.34 en fonction de DT/Dt , leur somme (<i>i.e.</i> le terme du membre de gauche). Droite pointillée verte : bissectrice du plan.	138
5.21	Données extraites du cas (3). Croix : terme de diffusion dans l'équation 5.34. Triangle : terme source d'énergie. Carrés : terme de compression/dilatation. Axes normalisés par $10^{-3}(t_{\text{TDC}}/T_0)$. Ligne pointillée : somme des termes ($= DT/Dt$).	140
5.22	Données extraites du cas (4). Croix : terme de diffusion dans l'équation 5.34. Triangle : terme source d'énergie. Carrés : terme de compression/dilatation. Axes normalisés par $10^{-3}(t_{\text{TDC}}/T_0)$. Ligne pointillée : somme des termes ($= DT/Dt$).	141
5.23	Evolution temporelle de la variable d'avancement le long de la trajectoire du maximum de température. Cercles : DNS du cas (4). Points : PSR initialisé à $t^* = 0.9762$. Tirets : à $t^* = 0.9773$. Ligne pleine : à $t^* = 0.9776$	142

5.24	scatter plots du terme source tabulé en fonction de (c, T_0) vs le terme source directement extrait de la DNS. Noir : T_0 local calculé à partir de 5.52 ; gris : T_0 calculé à partir de 5.52 et moyenné sur tout le domaine.	144
5.25	$t^* = 0.962$ - A gauche, coupe longitudinale de la norme de la vitesse (m/s) ; à droite, coupe longitudinale de T_0 (K).	146
5.26	Cas 2 - scatter plots T_0 v.s. c . Croix grises : $t^* = 0.962$; cercles noirs : $t^* = 1$; carrés gris : $t^* = 1.028$; triangles gris : $t^* = 1.355$	148
5.27	Cas 2 - Histogrammes du pourcentage du volume de la CC, à gauche pour les classes de c , et à droite, pour les classes de T_0 . Trait plein gris : $t^* = 0.962$; trait plein noir : $t^* = 1$; trait pointillé gris : $t^* = 1.028$	149
5.28	τ_{ig} en fonction de T_0 . Noir : cas 1, $T_{ac} = 16500K$; gris : cas 2, $T_{ac} = 18000K$	151
5.29	Coupes longitudinales extraites de la DNS des cas 1 et 2, juste avant l'auto-inflammation. A gauche, en échelle logarithmique, niveaux de u_{sp} (m/s). A droite, niveaux de la vitesse du son (m/s).	152
5.30	Histogramme du pourcentage du volume de la CC pour les classes de u_{sp} (m/s) juste avant l'auto-inflammation dans les deux cas. Noir : cas 1 à $t_{cas1}^* = 0.983$. Gris : cas 2 à $t_{cas2}^* = 1.355$	152
5.31	Coupes transversales des champs de $\dot{\omega}_c$ à gauche et des champs de pression adimensionnée par la pression moyenne à droite pendant l'auto-allumage. (a) : $x = 0.95$ cm. (b) : $x = 0.15$ cm	153
5.32	Cas 1 - $t^* = 0.983$, juste avant l'auto-inflammation. Iso-surface $u_{sp} = 485$ m/s coloré par la vitesse du son (m/s).	154
5.33	Cas 1 - $t^* = 0.987$, pendant l'auto-inflammation. Champ de la moyenne radiale de la pression.	154
5.34	Coupes longitudinales du champ de Δ (-) défini dans l'équation 5.64, juste avant l'auto-inflammation dans les deux cas.	156
5.35	$\langle \Delta c \rangle$ en fonction de c juste avant l'auto-inflammation, pour le cas 1 (à $t^* = 0.983$, en noir) et 2 (à $t^* = 1.355$, en gris).	157
5.36	Diagramme de l'évolution temporelle de la température normalisée avant l'auto-inflammation, construit à partir de solutions analytiques du mélange d'un scalaire dans des tourbillons [31]. Les nombres sous les courbes correspondent à des rapports arbitraires du temps caractéristique de mélange moléculaire et du temps caractéristique d'engouffrement. Les axes sont normalisés par le temps de mélange et la température de compression adiabatique obtenue au point mort haut. τ_{ig}^{Vortex} et τ_{ig}^{Layer} sont arbitraires ici.	159
A.1	Evolutions de grandeurs thermo-chimiques en fonction du temps adimensionné dans un réacteur homogène dont le volume varie en fonction du temps adimensionné (réponse calculée par CANTERA).	168
A.2	Organisation du calcul des propriétés thermodynamiques d'un gaz inerte dans SiTCom	170
A.3	Champ de température issus d'un cas 2D laminaire, au voisinage du plan d'admission (côté gauche). A gauche, NSCBC-3D sans correction pour la prise en compte de c_p et c_v variables. A droite, avec correction.	182
A.4	Champs instantanés issus d'un calcul 2D laminaire ; test des conditions aux limites.	183

A.5	Evolution en fonction du temps, des vitesses caractérisant la compression volumétrique. Trait noir pointillé : vitesse du piston. Trait rouge plein : U_o^* , la vitesse débitante cible calculée <i>via</i> la relation 5.21. Trait noir plein : vitesse débitante U_o effectivement prescrite par l'intermédiaire de l'approche NSCBC-3D, dans un cas 2D laminaire, sans fluctuation de fraction de mélange ($\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{st}$).	185
A.6	Comparaison des évolutions de la thermodynamique dans la chambre de combustion. Noir : moyenne spatiale de la DNS 2D laminaire. Rouge : réponse 0D, calcul Cantera pour un volume fonction du temps.	186
A.7	Réponses de réacteurs homogènes, en noir, à pression constante, et en rouge, à volume constant. A gauche, dépendance de Y_c^{eq} à T_0 ($T_0 \in [1000K, 1400K]$) et P_0 ($P_0 \in [2.10^5 Pa, 16.10^5 Pa]$), à $\mathcal{Z} = \mathcal{Z}_{st}$. A droite, dépendance de Y_c^{eq} à \mathcal{Z} , pour $P_0 = 10.10^5$ Pa et $T_0 = 1000$ K.	189
A.8	Evolution de Y_c pour $T_0 = 1000K$ et pour $P_0 \in [1atm, 10atm]$. Traits pleins : réponses issues des calculs Cantera en chimie complexe. Traits pointillés : réponses issues de l'intégration numérique de l'équation A.89, où $\dot{\omega}_{Y_c}^{Tab} = \dot{\omega}_{Y_c}(c, \mathcal{Z}, P_0, T_0)$	190

Liste des tableaux

1.1	Normes EURO relatives aux émissions polluantes des moteurs Diesel. Les quantités sont exprimées en mg/km.	16
1.2	Normes EURO relatives aux émissions polluantes des moteurs à essence. Les quantités sont exprimées en mg/km.	16
5.1	Comparaison des états thermodynamiques au point mort haut.	116
5.2	Cas simulés. T_{ac} : température d'activation, $T_0 = 343$ K. τ_{ig} : délai d'auto-inflammation. $t_{TDC} = 29$ ms. $u'/U_o(t)$: intensité turbulente à l'admission ($U_o(t)$ calculé <i>via</i> l'équation 5.21).	123
5.3	Cas 2 - Champs de moyennes radiales présentés dans le plan (x,r) . A gauche : $t^* = 0.962$; à droite : $t^* = 1.028$	150
A.1	Conditions thermochimiques initiales du calcul de réacteur homogène à volume fonction du temps.	167

Bibliographie

- [1] S.M. Aceves, D.L. Flowers, C.K. Westbrook, J.R. Smith, W. Pitz, R. Dibble, M. Christensen, and B. Johansson. A multi-zone model for prediction of hcci combustion and emissions. *SAE paper*, pages 01–0327, 2000.
- [2] S.M. Aceves, J. Martinez-Frias, D.L. Flowers, JR Smith, RW Dibble, JF Wright, and RP Hessel. A decoupled model of detailed fluid mechanics followed by detailed chemical kinetics for prediction of iso-octane hcci combustion. *SAE paper*, pages 01–3612, 2001.
- [3] A. M. Bartenev and B. E. Gelfand. Spontaneous initiation of detonation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 26 :29–55, 2000.
- [4] RW Bilger. Conditional moment closure for turbulent reacting flow. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 5 :436, 1993.
- [5] M. Bodenstein and H. Lutkemeyer. Quasi-steady state assumption. *z. Physics and Chemistry*, 114, 1924.
- [6] D. Bradley, C. Morley, XJ Gu, and DR Emerson. Amplified pressure waves during autoignition : relevance to cai engines. *SAE TRANSACTIONS*, 111(3) :2679–2690, 2002.
- [7] K. Bray. Turbulent flows with premixed reactants. *Turbulent reacting flows*, pages 115–183, 1980.
- [8] V. Bykov and U. Maas. The extension of the ildm concept to reaction–diffusion manifolds. *Combustion Theory and Modelling*, 11(6) :839–862, 2007.
- [9] R. Cabra, J.Y. Chen, RW Dibble, AN Karpetsis, and RS Barlow. Lifted methane-air jet flames in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, 143(4) :491–506, 2005.
- [10] CERFACS. Avbp handbook. 2006.
- [11] P. Chassaing. Turbulence en mécanique des fluides : analyse du phénomène en vue de sa modélisation à l’usage de l’ingénieur (politech). 2000.
- [12] J.H. Chen, E.R. Hawkes, R. Sankaran, S.D. Mason, and H.G. Im. Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities : I. fundamental analysis and diagnostics. *Combustion and flame*, 145(1) :128–144, 2006.
- [13] R. Chen and N. Milovanovic. A computational study into the effect of exhaust gas recycling on homogeneous charge compression ignition combustion in internal combustion engines fuelled with methane. *International journal of thermal sciences*, 41(9) :805–813, 2002.
- [14] M. Christensen, B. Johansson, P. Amneus, and F. Mauss. Supercharged homogeneous charge compression ignition. *SAE transactions*, 107 :1129–1144, 1998.
- [15] M. Christensen, B. Johansson, and P. Einewall. *Homogeneous Charge Compression Ignition (HCCI) Using Isooctane Ethanol and Natural Gas : A Comparison with Spark Ignition Operation*. Society of Automotive Engineers, 1997.
- [16] O. Colin, A. Pires da Cruz, and S. Jay. Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-d engine calculations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(2) :2649–2656, 2005.
- [17] D.J. Cook, H. Pitsch, J.H. Chen, and E.R. Hawkes. Flamelet-based modeling of auto-ignition with thermal inhomogeneities for application to hcci engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2) :2903–2911, 2007.
- [18] S.M. Correa and A.J. Dean. Turbulent broadening of autoignition limits. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 25, pages 1293–1299. Elsevier, 1994.
- [19] AR Curtis, M.J.D. Powell, and J.K. Reid. On the estimation of sparse jacobian matrices. *J. Inst. Math. Appl*, 13(1), 1974.
- [20] C.F. Curtiss and J.O. Hirschfelder. Transport properties of multicomponent gas mixtures. *The Journal of Chemical Physics*, 17 :550, 1949.

- [21] S. Delhaye, LMT Somers, JA van Oijen, and LPH de Goey. Incorporating unsteady flow-effects beyond the extinction limit in flamelet-generated manifolds. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1) :1051–1058, 2009.
- [22] P. Domingo and L. Vervisch. Triple flames and partially premixed combustion in autoignition of non-premixed turbulent mixtures. *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, pages 233–240, 1996.
- [23] P. Domingo and L. Vervisch. Triple flames and partially premixed combustion in autoignition of non-premixed turbulent mixtures. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 26, pages 233–240. Elsevier, 1996.
- [24] P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante. Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, 152(3) :415–432, 2008.
- [25] Y. Dubief and F. Delcayre. On coherent-vortex identification in turbulence. *Journal of Turbulence*, (1), 2000.
- [26] F. Ducros, F. Laporte, T. Souleres, V. Guinot, P. Moinat, and B. Caruelle. High-order fluxes for conservative skew-symmetric-like schemes in structured meshes : application to compressible flows. *Journal of Computational Physics*, 161(1) :114–139, 2000.
- [27] W.L. Easley, A. Agarwal, and G.A. Lavoie. Modeling of hcci combustion and emissions using detailed chemistry. *SAE paper*, pages 01–1029, 2001.
- [28] T. Echehki and J.H. Chen. Direct numerical simulation of autoignition in non-homogeneous hydrogen-air mixtures. *Combustion and Flame*, 134(3) :169–191, 2003.
- [29] H. El-Asrag and S. Menon. Large eddy simulation of soot formation in a turbulent non-premixed jet flame. *Combustion and flame*, 156(2) :385–395, 2009.
- [30] M. Embouazza. *Etude de l'auto-allumage par réduction des schémas cinétiques chimiques : application à la combustion homogène diesel*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, Institut Français du Pétrole, 2005.
- [31] N. Enjalbert, P. Domingo, and L. Vervisch. Mixing time-history effects in large eddy simulation of non-premixed turbulent flames : Flow-controlled chemistry tabulation. *Combustion and Flame*, 159(1) :336–352, 2012.
- [32] S.P. Fedotov. Statistical model of the thermal ignition of a distributed system. *Combustion and Flame*, 91(1) :65 – 70, 1992.
- [33] B. Fiorina, R. Baron, O. Gicquel, D. Thevenin, S. Carpentier, and N. Darabiha. Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ildm. *Combust. Theory Modelling*, 7(3) :449–470, 2003.
- [34] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using fpi flamelet tabulation. *Combustion and flame*, 140(3) :147–160, 2005.
- [35] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Premixed turbulent combustion modeling using tabulated detailed chemistry and pdf. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :867–874, 2005.
- [36] S. B. Fiveland and N. Assanis, D. Development of a two-zone hcci combustion model accounting for boundary layer effects. *SAE Technical Paper*, 2001-01-1028, 2001.
- [37] D. Flowers, S. Aceves, J. Martinez-Frias, R. Hessel, and R. Dibble. Effect of mixing on hydrocarbon and carbon monoxide emissions prediction for isoctane hcci engine combustion using a multi-zone detailed kinetics solver. *SAE transactions*, 112(4) :1172–1179, 2003.
- [38] D Flowers, S. Aceves, C. K. Westbrook, J. R. Smith, and R. Dibble. Detailed chemical kinetic simulation of natural gas hcci combustion : gas composition effects and investigations of control strategies. *Journal of Engineering for Gas Turbine and Power*, 123 :433,439, 2001.
- [39] J. Galpin, C. Angelberger, A. Naudin, and L. Vervisch. Large-eddy simulation of h₂-air auto-ignition using tabulated detailed chemistry. *Journal of Turbulence*, (9), 2008.
- [40] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin. Liminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ildm with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(2) :1901–1908, 2000.
- [41] O. Gicquel, D. Thevenin, M. Hilka, and N. Darabiha. Direct numerical simulation of turbulent premixed flames using intrinsic low-dimensional manifolds. *Combustion Theory and Modelling*, 3(3) :479–502, 1999.
- [42] V. Giovangigli. *Multicomponent flow modeling*. Birkhauser, 1999.
- [43] G. Godel, P. Domingo, and L. Vervisch. Tabulation of nox chemistry for large-eddy simulation of non-premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1) :1555–1561, 2009.

- [44] DG Goodwin. An open-source, extensible software suite for cvd process simulation. *Chemical Vapor Deposition XVI and EUROCVD*, 14(2003) :08, 2003.
- [45] S. Gottlieb and C.W. Shu. Total variation diminishing runge-kutta schemes. *Math. Comput.*, 67(221) :73–85, 1998.
- [46] XJ Gu, DR Emerson, and D. Bradley. Modes of reaction front propagation from hot spots. *Combustion and flame*, 133(1-2) :63–74, 2003.
- [47] P. Guibert, A. Keromnes, and G. Legros. Development of a Turbulence Controlled Rapid Compression Machine for HCCI Combustion. *SAE Technical Paper*, 2007-01-1869, 2007.
- [48] P. Guibert, A. Keromnes, and G. Legros. An Experimental Investigation of the Turbulence Effect on the Combustion Propagation in a Rapid Compression Machine. *Flow, turbulence and combustion*, 84(1) :79–95, 2010.
- [49] P. Guibert, C. Morin, and S. Mokhtari. Auto-ignition generated combustion. part 2 : thermodynamic fundamentals. *MTZ Worldwide*, 65, 2004.
- [50] E.R. Hawkes, R. Sankaran, P.P. Pébay, and J.H. Chen. Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities : Ii. parametric study. *Combustion and flame*, 145(1) :145–159, 2006.
- [51] X. He, MT Donovan, BT Zigler, TR Palmer, SM Walton, MS Wooldridge, and A. Atreya. An experimental and modeling study of iso-octane ignition delay times under homogeneous charge compression ignition conditions. *Combustion and flame*, 142(3) :266–275, 2005.
- [52] H. Hu and J. Keck. *Autoignition of adiabatically compressed combustible gas mixtures*. Society of Automotive Engineers, 1987.
- [53] A. Hultqvist, M. Christensen, B. Johansson, M. Richter, J. Nygren, J. Hult, and M. Alden. The hcci combustion process in a single cycle–speed fuel tracer lif and chemiluminescence imaging. *SAE Technical Paper*, pages 01–0424, 2002.
- [54] M. Ihme. On the role of turbulence and compositional fluctuations in rapid compression machines : Autoignition of syngas mixtures. *Combustion and Flame*, 2012.
- [55] M. Ihme and H. Pitsch. Prediction of extinction and reignition in nonpremixed turbulent flames using a flamelet/progress variable model : 1. a priori study and presumed pdf closure. *Combustion and flame*, 155(1) :70–89, 2008.
- [56] M. Ihme, L. Shunn, and J. Zhang. Regularization of reaction progress variable for application to flamelet-based combustion models. *Journal of Computational Physics*, 2012.
- [57] A. Jameson, W. Schmidt, E. Turkel, et al. Numerical solutions of the euler equations by finite volume methods using runge-kutta time-stepping schemes. *AIAA paper*, 81(-125) :9, 1981.
- [58] M. Jangi, R. Yu, and XS Bai. A multi-zone chemistry mapping approach for direct numerical simulation of auto-ignition and flame propagation in a constant volume enclosure. *Combustion Theory and Modelling*, 16(2) :221–249, 2012.
- [59] S. Jay and O. Colin. A variable volume approach of tabulated detailed chemistry and its applications to multidimensional engine simulations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2) :3065–3072, 2011.
- [60] RJ Kee, JF Grcar, MD Smooke, and JA Miller. Premix : A fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames. Technical report, Livermore, California : Sandia National Laboratories, 1996, 1992.
- [61] A. Keromnes. *Etude expérimentale et modélisation de la combustion par auto-inflammation Etude expérimentale et modélisation de la combustion par auto-inflammation Etude expérimentale et modélisation de la combustion par auto-inflammation sur machine à compression rapide*. PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 2008.
- [62] A.R. Kerstein, W.T. Ashurst, and F.A. Williams. Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Physical Review A*, 37(7) :2728, 1988.
- [63] M. Klein, A. Sadiki, and J. Janicka. A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 186(2) :652–665, 2003.
- [64] A.Y. Klimenko and R.W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent combustion. *Progress in energy and combustion science*, 25(6) :595–688, 1999.
- [65] O.M. Knio, H.N. Najm, and P.S. Wyckoff. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow : Ii. stiff, operator-split formulation. *Journal of Computational Physics*, 154(2) :428–467, 1999.
- [66] NP Komminos. Investigating the importance of mass transfer on the formation of hcci engine emissions using a multi-zone model. *Applied Energy*, 86(7) :1335–1343, 2009.

- [67] SH Lam. Using csp to understand complex chemical kinetics. *Combustion Science and Technology*, 89(5-6) :375–404, 1993.
- [68] J. Lavy, C. Angelberger, P. Guibert, S. Mokhtari, J. Lavy-IFP, and C. Angelberger-IFP. Towards a better understanding of controlled auto-ignition (cai) combustion process from 2-stroke engine results analyses. *SAE Technical Paper*, pages 01–1859, 2001.
- [69] H. Lehtiniemi, F. Mauss, M. Balthasar, and I. Magnusson. Modeling diesel spray ignition using detailed chemistry with a progress variable approach. *Combustion science and technology*, 178(10-11) :1977–1997, 2006.
- [70] A. Linan and A. Crespo. An asymptotic analysis of unsteady diffusion flames for large activation energies. *Combustion science and technology*, 14 :95–117, 1976.
- [71] G. Lodato. *Conditions aux limites tridimensionnelles pour la simulation directe et aux grandes échelles des écoulements turbulents : modélisation de sous-maille pour la turbulence en région de proche paroi*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2008.
- [72] G. Lodato, P. Domingo, and L. Vervisch. Three-dimensional boundary conditions for direct and large-eddy simulation of compressible viscous flows. *Journal of Computational Physics*, 227(10) :5105–5143, 2008.
- [73] G. Lodier, C. Merlin, P. Domingo, L. Vervisch, and F. Ravet. Self-ignition scenarios after rapid compression of a turbulent mixture weakly-stratified in temperature. *Combustion and Flame*, 2012.
- [74] G. Lodier, L. Vervisch, V. Moureau, and P. Domingo. Composition-space premixed flamelet solution with differential diffusion for in situ flamelet-generated manifolds. *Combustion and Flame*, 158(10) :2009–2016, 2011.
- [75] T. Lu, C.K. Law, and J. Chen. Development of non-stiff reduced mechanisms for direct numerical simulations. In *46th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit including The New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Reno, NV, USA*, 2008.
- [76] TF Lu, CS Yoo, JH Chen, and CK Law. Three-dimensional direct numerical simulation of a turbulent lifted hydrogen jet flame in heated coflow : a chemical explosive mode analysis. *Journal of Fluid Mechanics*, 652(1) :45–64, 2010.
- [77] U. Maas and S.B. Pope. Simplifying chemical kinetics : intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and Flame*, 88(3-4) :239–264, 1992.
- [78] U. Maas and SB Pope. Laminar flame calculations using simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 25, pages 1349–1356. Elsevier, 1994.
- [79] U. Maas and D. Thévenin. Correlation analysis of direct numerical simulation data of turbulent non-premixed flames. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 27, pages 1183–1189. Elsevier, 1998.
- [80] GM Makhviladze and DI Rogatykh. Nonuniformities in initial temperature and concentration as a cause of explosive chemical reactions in combustible gases. *Combustion and flame*, 87(3-4) :347–356, 1991.
- [81] E. Mastorakos, TA Baritaud, and TJ Poinot. Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows. *Combustion and Flame*, 109(1-2) :198–223, 1997.
- [82] E. Mastorakos and RW Bilger. Second-order conditional moment closure for the autoignition of turbulent flows. *Physics of Fluids*, 10 :1246, 1998.
- [83] E. Mastorakos, A.P. Da Cruz, TA Baritaud, and TJ Poinot. A model for the effects of mixing on the autoignition of turbulent flows. *Combustion science and technology*, 125(1) :243–282, 1997.
- [84] P. Meunier, E. Villermaux, et al. How vortices mix. *Journal of Fluid Mechanics*, 476 :213–222, 2003.
- [85] J.B. Michel, O. Colin, C. Angelberger, and D. Veynante. Using the tabulated diffusion flamelet model adf-pcm to simulate a lifted methane–air jet flame. *Combustion and Flame*, 156(7) :1318–1331, 2009.
- [86] R. Minetti, M. Carlier, M. Ribaucour, E. Therssen, and LR Sochet. A rapid compression machine investigation of oxidation and auto-ignition of $i_C n_7/i_C$ -heptane : Measurements and modeling. *Combustion and Flame*, 102(3) :298–309, 1995.
- [87] Y. Mizobuchi, J. Shinjo, S. Ogawa, and T. Takeno. A numerical study on the formation of diffusion flame islands in a turbulent hydrogen jet lifted flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1) :611–619, 2005.
- [88] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. From large-eddy simulation to direct numerical simulation of a lean premixed swirl flame : Filtered laminar flame-pdf modeling. *Combustion and Flame doi :10.1016/j.combustflame.2010.12.004*, 2011.
- [89] UC Müller, N. Peters, and A. Linan. Global kinetics for $i_C n_7/i_C$ -heptane ignition at high pressures. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 24, pages 777–784. Elsevier, 1992.

- [90] H.N. Najm, P.S. Wyckoff, and O.M. Knio. A semi-implicit numerical scheme for reacting flow : I. stiff chemistry. *Journal of Computational Physics*, 143(2) :381–402, 1998.
- [91] P.M. Najt and D.E. Foster. Compression-ignited homogeneous charge combustion. Technical report, 1983.
- [92] S. Nambully. *Large eddy simulation of turbulent premixed and stratified flames*. PhD thesis, INSA de Rouen, 2012.
- [93] P.D. Nguyen, L. Vervisch, V. Subramanian, and P. Domingo. Multidimensional flamelet-generated manifolds for partially premixed combustion. *Combustion and Flame*, 157(1) :43–61, 2010.
- [94] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient tensor. *Flow, Turbulence and Combustion*, 62(3) :183–200, 1999.
- [95] Y. Niu, L. Vervisch, and P.D. Tao. An optimization-based approach to detailed chemistry tabulation : Automated progress variable definition an optimization-based approach to detailed chemistry tabulation : Automated progress variable definition an optimization-based approach to detailed chemistry tabulation : An opimization-based approach to detailed chemistry tabulation : Automated progress variable definition. *Submitted to Combustion and Flame*, 2012.
- [96] M. Noguchi, Y. Tanaka, T. Tanaka, and Y. Takeuchi. *A study on gasoline engine combustion by observation of intermediate reactive products during combustion*. Society of Automotive Engineers, 1979.
- [97] S. Onishi and S.H. Jo. Active thermo-atmosphere combustion (atac)—a new combustion process for internal combustion engines. Technical report, 1979.
- [98] C. Pera, O. Colin, and S. Jay. Development of a fpi detailed chemistry tabulation methodology for internal combustion engines. *Oil & Gas Science and Technology-Revue de l'IFP*, 64(3) :243–258, 2009.
- [99] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 10(3) :319–339, 1984.
- [100] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000.
- [101] N. Peters and L. Wang. Dissipation element analysis of scalar fields in turbulence. *Comptes Rendus Mecanique*, 334(8) :493–506, 2006.
- [102] A. Pires Da Cruz, TA Baritaud, and TJ Poinso. Self-ignition and combustion modeling of initially nonpremixed turbulent systems. *Combustion and flame*, 124(1) :65–81, 2001.
- [103] T. Poinso, S. Candel, and A. Trouvé. Applications of direct numerical simulation to premixed turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 21(6) :531–576, 1995.
- [104] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and numerical combustion*. RT Edwards, Inc., 2005.
- [105] T.J. Poinso and S.K. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *Journal of computational physics*, 101(1) :104–129, 1992.
- [106] S. B. Pope. Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1(1) :41–63, 1997.
- [107] D.A. Schwer, P. Lu, W.H. Green Jr, and V. Semiao. A consistent-splitting approach to computing stiff steady-state reacting flows with adaptive chemistry. *Combust. Theory Modelling*, 7(2) :383–399, 2003.
- [108] G.P. Smith, D.M. Golden, M. Frenklach, N.W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C.T. Bowman, R.K. Hanson, S. Song, W.C. Gardiner Jr, et al. Gri-mech 3.0. URL : http://www.me.berkeley.edu/gri_mech, 1999.
- [109] S. Sreedhara and KN Lakshmisha. Direct numerical simulation of autoignition in a non-premixed, turbulent medium. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28(1) :25–33, 2000.
- [110] S. Sreedhara and KN Lakshmisha. Autoignition in a non-premixed medium : Dns studies on the effects of three-dimensional turbulence. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29(2) :2051–2059, 2002.
- [111] C. Stan and P. Guibert. Auto-ignition generated combustion. part 1. thermodynamic fundamentals ; verbrennungssteuerung durch selbst-zuendung. teil 1. thermodynamische grundlagen. *Motortechnische Zeitschrift*, 65(1) :56–62, 2004.
- [112] G. Subramanian. *Modélisation de l'auto-inflammation : analyse des effets de la dilution par les gaz brûlés et des interactions avec la turbulence dédiée aux moteurs Diesel à charge homogène*. PhD thesis, INSA de Rouen, Institut Français du Pétrole., 2005.
- [113] CJ Sung, CK Law, and J.Y. Chen. Augmented reduced mechanisms for no emission in methane oxidation. *Combustion and Flame*, 125(1-2) :906–919, 2001.

- [114] DG Talley. Universal definitions of mixture fractions and progress variables for arbitrary states of premixing. *Combustion and flame*, 88(1) :83–101, 1992.
- [115] S. Tanaka, F. Ayala, and J.C. Keck. A reduced chemical kinetic model for hcci combustion of primary reference fuels in a rapid compression machine. *Combustion and Flame*, 133(4) :467–481, 2003.
- [116] D. Thévenin and S. Candel. Ignition dynamics of a diffusion flame rolled up in a vortex. *Physics of Fluids*, 7 :434, 1995.
- [117] K.W. Thompson. Time dependent boundary conditions for hyperbolic systems. *Journal of Computational Physics*, 68(1) :1–24, 1987.
- [118] R.H. Thring. Homogeneous-charge compression-ignition (hcci) engines. *SAE paper*, 89206, 1989.
- [119] JA Van Oijen, FA Lammers, and LPH De Goeij. Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds. *Combustion and Flame*, 127(3) :2124–2134, 2001.
- [120] L. Vervisch, R. Hauguel, P. Domingo, and M. Rullaud. Three facets of turbulent combustion modelling : Dns of premixed v-flame, les of lifted nonpremixed flame and rans of jet-flame. *Journal of turbulence*, (5), 2004.
- [121] L. Vervisch and T. Poinso. Direct numerical simulation of non-premixed turbulent flames. *Annual review of fluid mechanics*, 30(1) :655–691, 1998.
- [122] D. Veynante and L. Vervisch. *Turbulent combustion modeling*. Prog Energy Combust Sci, 2002.
- [123] R. Vicquelin. *Tabulation de la cinétique chimique pour la modélisation et la simulation de la combustion turbulente*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2010.
- [124] D. Voisin, A. Marchal, M. Reuillon, J.C. Boettner, and M. Cathonnet. Experimental and kinetic modeling study of cyclohexane oxidation in a jsr at high pressure. *Combustion science and technology*, 138(1-6) :137–158, 1998.
- [125] K. Wang, G. Ribert, P. Domingo, and L. Vervisch. Self-similar behavior and chemistry tabulation of burnt-gas diluted premixed flamelets including heat-loss. *Combustion Theory and Modelling*, 14(4) :541–570, 2010.
- [126] L. Wang and N. Peters. The length-scale distribution function of the distance between extremal points in passive scalar turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 554 :457–476, 2006.
- [127] L. Wang and N. Peters. Length-scale distribution functions and conditional means for various fields in turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 608 :113–138, 2008.
- [128] F.A. Williams. Recent advances in theoretical descriptions of turbulent diffusion flames. *S.N.B. Murthy Ed.*, 1975.
- [129] G. Williams. *Combustion theory*. 1985.
- [130] G. Woschni. A universally applicable equation for the instantaneous heat transfer coefficient in the internal combustion engine. *SAE Technical Paper*, 670931, 1967.
- [131] J. Würmel and JM Simmie. Cfd studies of a twin-piston rapid compression machine. *Combustion and flame*, 141(4) :417–430, 2005.
- [132] C.S. Yoo, Y. Wang, A. Trouvé, and H.G. Im. Characteristic boundary conditions for direct simulations of turbulent counterflow flames. *Combustion Theory and Modelling*, 9(4) :617–646, 2005.
- [133] Y.B. Zeldovich. Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions. *Combustion and Flame*, 39(2) :211–214, 1980.
- [134] Y. Zhang, B. Rogg, and KNC Bray. 2-d simulation of turbulent autoignition with transient laminar flamelet source term closure. *Combustion science and technology*, 105(4-6) :211–227, 1995.
- [135] YZ Zhang, EH Kung, and DC Haworth. A pdf method for multidimensional modeling of hcci engine combustion : Effects of turbulence/chemistry interactions on ignition timing and emissions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(2) :2763–2771, 2005.

