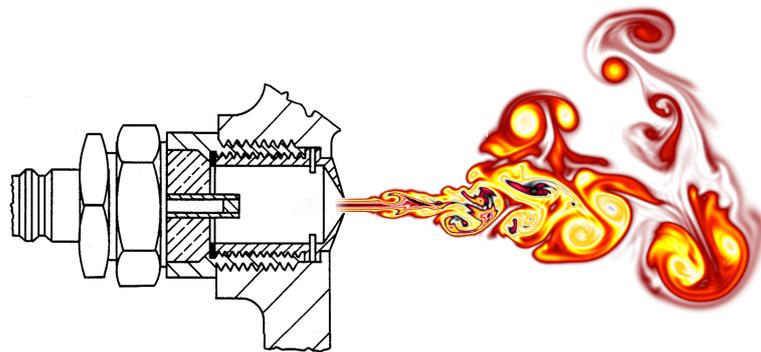


MÉMOIRE DE PROJET DE FIN D'ETUDES

SIMULATIONS NUMÉRIQUES AVANCÉES
EN AÉROTHERMOCHIMIE POUR LA
CONCEPTION D'UNE TECHNOLOGIE
D'ALLUMAGE PAR JETS TURBULENTS
DANS LES MOTEURS À ALLUMAGE
COMMANDÉ

QUENTIN MALÉ – 19 SEPTEMBRE 2017



CERFACS

42 Avenue Gaspard Coriolis

31057 Toulouse

Cedex 01, France

Superviseurs scientifiques :

Thierry POINSOT

Olivier VERMOREL

Superviseur industriel :

Frédéric RAVET

 CERFACS

CENTRE EUROPÉEN DE RECHERCHE ET DE FORMATION AVANCÉE EN CALCUL SCIENTIFIQUE

**GROUPE
RENAULT**

*Le pessimisme face au futur ne doit pas être un argument
supplémentaire pour l'inaction dans le présent.*

A l'ensemble de ma famille, pour tous leurs sacrifices et leur soutien.

RÉSUMÉ

L'augmentation fulgurante de l'utilisation de l'énergie via la combustion ces trente dernières années contraint les industriels à concevoir des systèmes répondant à de nombreuses exigences en terme de consommation, d'émissions polluantes ou encore de nuisances sonores pour des problématiques écologiques évidentes. Alors que le parc automobile mondial ne cesse d'augmenter, les émissions des véhicules participent à l'augmentation de la pollution de l'air et de la concentration de Gas à Effet de Serre (GES). Face à ce constat, les motoristes recherchent de façon perpétuelle des innovations qui pourraient permettre d'améliorer le rendement et de réduire les émissions polluantes des Moteur à Combustion Interne (MCI) en attendant la transition écologique dont l'humanité a besoin. Dans ce contexte, ce document s'attarde à étudier une solution technologique : la combustion en mélange pauvre homogène au moyen d'un allumage par jets turbulents, générés à l'aide d'une préchambre de combustion. Cette méthode de combustion implique une augmentation du rendement et donc une diminution de la consommation spécifique et des émissions de CO_2 . De plus, elle permet une réduction drastique des émissions polluantes. Néanmoins, l'application de cette technologie n'est pas triviale : de nombreux verrous scientifiques et technologiques sont présents ce qui rend la recherche ineffablement riche.

La problématique principale est le succès de l'allumage du mélange pauvre homogène, fortement dilué. L'allumage par jets turbulents peut apporter une solution technologique à cette problématique en étant capable de produire un allumage fiable et efficace en mélange pauvre. En effet, cette technologie induit des taux de dégagement de chaleur très importants dans un laps de temps très court en produisant de multiples sites d'allumage par jets turbulents. Cela implique une consommation rapide de la charge principale avec une faible variabilité cyclique.

La recherche et le développement d'une telle technologie impliquent une bonne compréhension des phénomènes physiques et de la structure des flammes turbulentes générées. La simulation numérique des écoulements fluides réactifs à l'aide d'une modélisation des phénomènes aérothermochimiques est pour cela un outil adapté. Elle apporte des informations essentielles pour la conception de la géométrie et pour la mise au point du MCI. En effet, des simulations de types Direct Numerical Simulation (DNS) et Large Eddy Simulation (LES) ont le potentiel de prédiction adéquat pour capter les phénomènes instationnaires primordiaux sur ce type d'application. Ces simulations sont alors utilisées afin d'étudier les processus aérothermochimiques mis en jeu comme les interactions flamme/paroi, les interactions flamme/turbulence, la pénétration des jets turbulents, la combustion turbulente, les réactions chimiques, *etc.* mais également processus aérodynamiques non réactifs comme le remplissage et la vidange de la préchambre générant les jets turbulents, et ce afin d'orienter la conception de cette technologie innovante.

ABSTRACT

Engine designers face rigorous constraints regarding consumption, pollutant and noise emissions due to environmental issues. As individual car usage constantly grows, car emissions cause greenhouse gas and pollutant accumulation in the atmosphere. Consequently, engine designers are looking for innovations in order to improve efficiency and pollutant emissions. This study focuses on a technological breakthrough where a main homogeneous lean mixture is ignited with turbulent jets produced by an upstream prechamber. Lean burning improves energy efficiency and furthermore reduces pollutant emissions. However, there are scientific and technical obstacles with this technology that are yet unresolved, motivating the present study.

Lean combustion is sought in many modern designs for its low emissions and high energy efficiency. A common challenge is the ignition of lean homogeneous mixtures. The turbulent jets ignition technology allows to burn lean mixture with high efficiency and reliability. In fact, this ignition process leverages multiple turbulent jets, inducing fast burning of the main lean fuel/air mixture and producing high heat release rates. Cyclic variability is thus reduced and lean mixture burning is made possible.

Physical phenomena and turbulent flame structures need to be investigated and well understood in order to design this technology. Computational Fluid Dynamics (CFD) is nowadays a useful tool in order to investigate and design aerothermochemical processes. DNS and LES are able to simulate unsteady combustion processes which are of primary importance in this technology. In order to design it, advanced CFD simulations are therefore used to investigate flame propagation and combustion processes, turbulent jet penetration, flame/turbulence and flame/wall interaction as well as intake and exhaust prechamber processes.

TABLE DES MATIÈRES

I	INTRODUCTION GÉNÉRALE AU SUJET	1
1	INTRODUCTION	3
1.1	Les problématiques liées au système de transport	4
1.2	Motivations et objectifs	5
1.3	Contexte industriel	5
1.4	Contexte scientifique	6
1.5	Plan du manuscrit	7
2	PRÉSENTATION DE LA TECHNOLOGIE	9
2.1	La combustion pauvre homogène	9
2.2	L'allumage par jets turbulents	11
3	REVUE DES SYSTÈMES D'ALLUMAGE PAR PRÉCHAMBRE DE COMBUSTION	17
3.1	Historique	17
3.2	Revue de différentes technologies	18
4	PROBLÉMATIQUE ET PLAN DE TRAVAIL	25
4.1	Description de la problématique	25
4.2	Plan de travail	27
II	CARACTÉRISATION PRÉLIMINAIRE DU COMPORTEMENT D'UN ALLUMAGE PAR JETS TURBULENTS	31
5	ÉTUDE PRÉLIMINAIRE DE LA CHIMIE DE L'ISO-OCTANE	33
5.1	Chimie globalement réduite	37
5.2	Mécanisme squelette	37
5.3	Chimie analytiquement réduite	38
6	PROPAGATION D'UN FRONT DE FLAMME À TRAVERS UN CONDUIT	41
6.1	Configuration du calcul	41
6.2	Présentation des résultats	42
6.3	Synthèse	44
7	ÉTUDE DE L'ALLUMAGE D'UNE CHAMBRE À PRESSION CONSTANTE	45
7.1	Enceinte initialement au repos	45
8	ÉTUDE DE L'ALLUMAGE D'UNE CHAMBRE À VOLUME CONSTANT	51
8.1	Définitions préliminaires	51
8.2	Étude des régimes de combustion	51
8.3	Étude de l'influence de la position de l'allumage initial	58
9	CONCLUSION ET PERSPECTIVES	65
9.1	Conclusion	65
9.2	Perspectives	65
III	ANNEXE : TRAVAUX COMPLÉMENTAIRES	69
A	MODÈLE OD COMBUSTION EN VOLUME SEMI CONFINÉ	71
A.1	Système d'équation aux dérivées ordinaires	71
B	ÉTUDE DU COMPORTEMENT D'UNE CHIMIE ARC POUR LE PROPANE	77
B.1	Chimie analytiquement réduite	77
IV	ANNEXE : CONCEPTS THÉORIQUES ET MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS RÉACTIFS PAR LA SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES DE LA TURBULENCE	83
C	ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES POUR UN MÉLANGE MULTI-ESPÈCES RÉACTIF	85
D	MÉTHODES DE RÉOLUTION DES ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES	91
E	SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES DE LA TURBULENCE	95

TABLE DES MATIÈRES

E.1	Equations pour la SGE non réactive	95
F	CONCEPTS THÉORIQUES EN COMBUSTION	101
F.1	Combustion pré mélangée	101
F.2	Combustion non prémélangée	106
F.3	Résolution de l'interaction de sous maille chimie-turbulence	110
F.4	Modélisations de l'allumage	114
G	DESCRIPTION DE LA CHIMIE	115
G.1	Chimie détaillée	115
G.2	Chimie tabulée	115
G.3	Chimie globalement réduite	116
G.4	Mécanisme squelette	117
G.5	Chimie analytiquement réduite	117
H	SCHÉMAS NUMÉRIQUES	121
	BIBLIOGRAPHIE	123

ACRONYMES

API	Application Programming Interface
ALE	Arbitrary Lagrangian Eulerian
ARC	Analytical Reduced Chemistry
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFM	Coherent Flame Model
CFL	Courant Friedrichs Lewy
CERFACS	Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique
CMC	Conditional Moment Closure
CPU	Central Processing Unit
DNS	Direct Numerical Simulation
DRGEP	Directed Relation Graph method with Error Propagation
ED	Energy Deposition
FPI	Flame Prolongation of Intrinsic Low-Dimensional Manifold
FGM	Flame Generated Manifold
GES	Gas à Effet de Serre
GRC	Global Reduced Chemistry
HCCI	Homogeneous Charge Compression Ignition
ISSIM	Imposed Stretch Spark Ignition Model
IPCC	Intergovernmental Panel on Climate Change
ITC	Interpolation Temporelle Conditionnée
IFPEN	Institut Français du Pétrole et des Énergies Nouvelles
LAG	Lavinia Aktyvatsia Gorenina
LES	Large Eddy Simulation
LOI	Level Of Importance
MCI	Moteur à Combustion Interne
NSCBC	Navier Stokes Characteristic Boundary Condition
OMS	Organisation Mondiale de la Santé
ONERA	Office National d'Études et de Recherches Aéronautiques
PDF	Probability Density Function
PEA	Partial-Equilibrium Approximation
PM	Particule Matter
PME	Pression Moyenne Effective
PMI	Pression Moyenne Indiquée
QSS	Quasi-Steady State
RANS	Reynolds Averaged Navier-Stokes
SCR	Selective Catalytic Reduction
SI	Spark Ignition
SGS	Sub-Grid Scale
TAG	Turbine A Gaz
TFLES	Thickened Flame model for Large Eddy Simulation
THI	Turbulence Homogène Isotrope
UML	Unified Modeling Language

SYMBOLES ROMAINS

Symbole	Signification	Unités SI
c	Concentration	mol m^{-3}
cp	Capacité calorifique massique à pression constante	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
cv	Capacité calorifique massique à volume constant	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
Da	Nombre de Damkholer	–
E	Énergie totale	J
Ec	Énergie cinétique	J
F	Coefficient d'épaississement du modèle de flamme épaissie	–
HR	Taux de dégagement de chaleur	J s^{-1}
hr	Taux de dégagement de chaleur par unité de volume	$\text{J s}^{-1} \text{m}^{-3}$
$J_{j,k}$	Flux diffusif de l'espèce k	$\text{kg m}^{-2} \text{s}^{-1}$
Ka	Nombre de Karlovitz	–
k	énergie cinétique du champ fluctuant	J kg^{-1}
L_a	Longueur de Markstein	m
l_k	Longueur caractéristique de Kolmogorov	m
l_t	Longueur caractéristique intégrale de la turbulence	m
m	Masse	kg
\dot{m}	Débit massique	kg s^{-1}
Ma	Nombre de Markstein	–
$Ndim$	Nombre de dimensions spatiales	–
Pe	Nombre de Peclet	–
P	Pression	Pa
q_j	Tenseur des flux de chaleur	$\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}$
\dot{Q}	Terme source d'énergie extérieure	$\text{J m}^{-3} \text{s}^{-1}$
qdm	Quantité de mouvement	kg m s^{-1}
r	Constante spécifique des gaz parfaits	$\text{J kg}^{-1} \text{K}^{-1}$
R	Constante universelle des gaz parfaits	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$
rv_c	Rapport volumétrique de compression	–
rv	Rapport de volume	–
S_L^0	Vitesse de flamme laminaire plane	m s^{-1}
S_c	Vitesse de consommation	m s^{-1}
S_d	Vitesse de déplacement	m s^{-1}
S_a	Vitesse absolue	m s^{-1}
T	Température	K
T_{xx}	Temps pour lequel xx % de la masse est brûlée	s
u'	Vitesse fluctuante	m s^{-1}
U	Vitesse	m s^{-1}
u_i	$i^{\text{ème}}$ composante de la vitesse	m s^{-1}
V	Volume	m^3
v	Volume mort	m^3
W	Masse molaire	kg mol^{-1}
X	Fraction molaire	xiii
Y	Fraction massique	–

SYMBOLES GRECS

Symbole	Signification	Unités SI
γ	Rapport des capacités calorifiques	—
δ_L^0	Épaisseur de flamme laminaire	m
δV	Petit élément de volume	m ³
ϵ	Taux de dissipation de l'énergie cinétique du champ fluctuant	J kg ⁻¹ s ⁻¹
η	Rendement	—
κ	Étirement de flamme	—
λ	Conductivité thermique	J s ⁻¹ m ⁻¹ K ⁻¹
μ	Viscosité dynamique	Pa s
ν	Viscosité cinématique	m ² s ⁻¹
ρ	Masse volumique	kg m ⁻³
τ_b	Durée de combustion	s
τ_i	Temps d'allumage	s
τ_c	Temps caractéristique de la chimie	s
τ_k	Temps caractéristique de Kolmogorov	s
τ_t	Échelle intégrale de temps de la turbulence	s
τ_{AI}	Délai d'auto-inflammation	s
τ_I	Délai d'inflammation	s
τ	Tenseur des forces visqueuses	J m ⁻³
Φ	Richesse	—
$\dot{\omega}_T$	Terme source chimique	J m ⁻³ s ⁻¹
$\dot{\omega}_k$	Terme source de l'espèce k	kg m ⁻³ s ⁻¹

INDICES ET EXPOSANTS

INDICES

<i>b</i>	brûlé (burnt)
<i>init</i>	initial
<i>k</i>	espèce k
<i>n</i>	normal
<i>out</i>	sortie (out)
<i>pc</i>	préchambre
<i>t</i>	total
<i>u</i>	non brûlé (unburnt)
	unitaire

EXPOSANTS

<i>MR</i>	Most Reactive
<i>Pcte</i>	pression constante
<i>ref</i>	référence

Première partie

INTRODUCTION GÉNÉRALE AU SUJET

Cette partie s'attarde à introduire le sujet de ce travail de recherche. Elle se veut lisible de tous.

La pollution de l'air : 7 millions de morts par an.

Le tabac : 6 millions.

Les accidents de la route : 1,3 millions.

Les guerres : de 450 000 à 500 000.

Les crimes de sang : 200 000.

Les requins : 10.

— Yves Paccalet

INTRODUCTION

L'homme est un organisme vivant. Comme tous ses homologues, il consomme... Ce faisant, il détruit à grande vitesse la seule maison dont il dispose. La concentration de CO₂ a atteint 400 ppm en 2016, et ce de façon permanente. Jamais, depuis les 800 000 dernières années, la concentration en CO₂ n'a été aussi haute. Le CO₂ est le principal gaz à effet de serre qui contribue au réchauffement climatique en cours. Il est émis par les activités humaines et principalement lors de la combustion des énergies fossiles. Il est également issu de certains procédés industriels, la déforestation et l'agriculture intensive. Néanmoins, le CO₂ est également émis par des activités naturelles : éruptions volcaniques et respiration des êtres vivants. « Rien n'a interrompu la course du CO₂ vers 400 ppm. C'est maintenant un fait accompli. Mais ce qui va se passer à partir de maintenant relève toujours du climat et est toujours sous notre contrôle. Reste à savoir dans quelle proportion nous continuerons à dépendre des énergies fossiles pour l'énergie. » — Ralph Keeling.

Pour notre plus grand malheur, en plus du CO₂ qui contribue au réchauffement climatique, la combustion rejette de nombreux polluants dans l'atmosphère (NO_x, SO₂, particules de suies...). La pollution atmosphérique a des conséquences sanitaires (pathologies cardiorespiratoires et cardiovasculaires) et environnementales : certaines émissions provoquent des pluies acides, d'autres l'eutrophisation des milieux aquatiques. Les émissions polluantes issues du transport sont réglementées par des normes européennes et un cycle d'homologation aujourd'hui remis en question car non représentatif des conditions d'utilisations réelles. Néanmoins, ces restrictions ont permis la création d'innovations technologiques (comme le pot catalytique, le filtre à particules, la recirculation des gaz d'échappement, le contrôle moteur avancé ou l'injection haute pression par exemple). Ces innovations ont permis d'augmenter le rendement et de diminuer fortement les rejets polluants, mais la croissance du trafic et la démocratisation du véhicule de tourisme individuel ont miné les progrès réalisés.

La pollution aux particules fines (Particule Matter (PM) 10 et PM 2.5), au dioxyde d'azote, à l'ozone et au benzène a occasionné divers épisodes de pics de pollution dans les métropoles françaises. Sont en cause les conditions météorologiques mais également les émissions industrielles, routières et le chauffage au fioul. La France est visée par une procédure d'infraction amorcée par la Commission européenne en raison du non-respect de la directive de 2008 sur la qualité de l'air. Cette pollution n'est pas à prendre à la légère : un décès sur dix dans le monde est attribuable à une exposition à la pollution de l'air et 87% des individus dans le monde vivent dans des zones ne respectant pas les recommandations de l'Organisation Mondiale de la Santé (OMS) pour la qualité de l'air [78]. Les pertes en vies humaines provoquées par la pollution de l'air sont sources de souffrances et de ralentissement économique. Les jeunes enfants sont particulièrement exposés à ce problème : ils absorbent plus d'air rapporté à leur poids que les adultes. « Les substances polluantes endommagent les poumons des enfants mais elles peuvent aussi franchir les barrières protectrices du cerveau et endommager irrémédiablement leur développement cérébral, compromettant leur avenir. » — Anthony Lake.

Il est alors aisé de comprendre l'urgence face à laquelle nous devons faire face. En pratique, les gouvernements ont soumis le secteur du transport à la seule logique de la rentabilité. Pourtant, tout doit être fait pour minimiser les émissions de ce secteur. Cela passe par le développement de transports écologiques et accessibles : développement des transports en commun, des réseaux ferroviaire et fluvial, et du cyclisme¹. Il est également nécessaire de changer de politique en ce qui concerne l'utilisation

1. En effet, le vélo est non polluant, bon pour la santé, économique pour le cycliste comme pour la collectivité. Pourtant les cyclistes ne bénéficient pas de la sécurité et du confort nécessaires. Au-delà des déclarations de bonnes intentions, le vélo est peu soutenu.

massive du véhicule individuel comme moyen de transport et les importations/exportations commerciales qui ne sont souvent pas indispensables à la vie². Cela passe également par l'amélioration du rendement et la diminution des émissions polluantes des MCI. En effet, certaines activités nécessitent encore aujourd'hui le besoin absolu d'un MCI comme les véhicules de secours, d'intervention et de maintien de l'ordre. De plus, la transition écologique ne peut être instantanée : il est alors nécessaire de réduire au maximum les émissions produites pendant cette période qui est malheureusement sans cesse repoussée et donc rallongée...

Le travail présenté tout au long de ce document apporte une contribution au dernier objectif énuméré qui est l'amélioration du rendement ainsi que la diminution des émissions de GES et des émissions polluantes des MCI.

1.1 LES PROBLÉMATIQUES LIÉES AU SYSTÈME DE TRANSPORT

Nos moyens de transport sont très largement basés sur la combustion d'hydrocarbures fossiles. Dès lors, trois problématiques majeures peuvent être soulignées :

- les effets des émissions sur le climat ;
- les effets des émissions sur la santé ;
- la sécurité énergétique en ce qui concerne la dépendance aux énergies fossiles.

LES EFFETS SUR LE CLIMAT Un récent rapport de l'Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) [169] montre une augmentation des émissions de GES au fil des années. Une part très importante (65% en 2010) des émissions mondiales de GES est due à la combustion des énergies fossiles et aux processus industriels. Cette part est en nette augmentation, ainsi elle était de 55% en 1970. Les transports contribuent à hauteur de 14% aux émissions mondiales de GES, c'est le quatrième secteur d'activité le plus contributeur aux émissions mondiales de GES. Les plus gros contributeurs étant la production d'électricité et de chaleur (25%), l'agriculture (24%) et l'industrie (21%). Cependant, dans les pays les plus développés, la part du transport dans les émissions de GES est néanmoins plus importante : 24% en Europe [56] et 32 % aux Etats-unis [178].

L'augmentation des GES dans l'atmosphère réduit la perte d'énergie de l'atmosphère vers l'espace et rend la planète plus chaude qu'elle ne devrait l'être. Les répercussions sont directes : les températures moyennes mondiales augmentent et la fonte des glaces fait monter le niveau de la mer de façon non négligeable. Ces effets semblent être la cause de l'augmentation des catastrophes naturelles, changeant le comportement naturel du climat.

LES EFFETS SUR LA SANTÉ Les émissions issues des MCI posent des problèmes de santé publique. Les gaz et particules issus de la combustion peuvent être dangereux pour les êtres vivants. Les NO_x contribuent à la formation d'ozone et réagissent pour former des nitrates, ce qui pose des problèmes respiratoires graves [177]. Les hydrocarbures imbrulés sont un danger réel pour la santé, ils provoquent des irritations des yeux et des voies respiratoires (nez, gorge, poumon, ...), des maux de tête, des nausées, des pertes de coordination et des dommages au foie, aux reins et au système nerveux³. Les émissions de CO sont très nocives : le CO est incolore, inodore mais extrêmement toxique. Il affecte les molécules d'hémoglobines en occupant la place réservée pour le transport de l'oxygène dans ces dernières. Les molécules d'hémoglobines ne transportent alors plus d'oxygène. Des concentrations de l'ordre de 667 ppm peuvent causer l'altération de 50 % des molécules d'hémoglobines [172], ce qui provoque pertes de connaissance, comas et peut mener à la mort. Les MCI émettent également des particules (notées PM) qui sont particulièrement néfastes. Les effets de l'inhalation des PM impliquent asthmes, cancers, maladies cardiovasculaires, maladies respiratoires, naissances prématurées, malformations à la naissance et morts prématurées [57]. Les suies (qui sont un type de PM), ont été classées cancérigène par l'agence internationale pour la recherche du cancer sous l'organisation mondiale de la santé [165].

2. Oui, il est possible de vivre sans importer des avocats d'autres continents en toute saison...

3. Difficile de ne pas acter envers la réduction drastique des émissions polluantes au quotidien lorsque de telles conclusions sont présentées...

LA SÉCURITÉ ÉNERGÉTIQUE Beaucoup de pays sont dépendants de l'importation de pétrole pour assurer leur besoins en terme de transport. Cela pose de véritables questions en ce qui concerne la sécurité énergétique de tels pays. En 2010, en Europe, le pétrole représentait 94% de l'énergie consommée pour assurer les besoins de transport et 84% du pétrole consommé a été importé ce qui a représenté un coût d'importation pouvant monter jusqu'à 1 million d'euros par jour [55] (coût atteint en 2011). Le pétrole (et donc notre mobilité) dépend de pays politiquement instables ce qui augmente les problématiques liées à la sécurité. Les effets de la dépendance au pétrole sont trop importants pour être négligés. Une stratégie peut être de remplacer les hydrocarbures par des énergies alternatives et de construire l'infrastructure nécessaire aux développements de ces dernières. Cependant, l'amélioration de l'efficacité des MCI dirigée par les normes européennes de plus en plus strictes est nécessaire en attendant la décarbonisation graduelle obligatoire des énergies. L'effort réalisé est néanmoins très largement gâché par des politiques inadéquates résultant en la démocratisation de l'utilisation massive du véhicule individuel...

1.2 MOTIVATIONS ET OBJECTIFS

SECTION 1.1 démontre l'importance de réduire de façon drastique les émissions de GES et de polluants. A court terme, il est primordial de réduire l'impact du choix de la production massive de l'énergie par la combustion qui a été effectué par les générations précédentes. La transition énergétique est nécessaire et obligatoire mais ne peut se faire que progressivement. Les acteurs travaillant sur le développement des énergies nouvelles ont des objectifs nobles qui doivent être respectés et atteints. Pour minimiser l'impact des émissions actuelles il est nécessaire, en parallèle du travail sur la transition énergétique, d'optimiser les technologies utilisant la combustion comme moyen de production de l'énergie.

Dans ce contexte, ce travail consiste à la recherche et au développement d'une technologie en rupture afin d'optimiser l'efficacité et de réduire les émissions polluantes des MCI à allumage commandé. Cette technologie, présentée en détail **CHAPITRE 2**, consiste à l'allumage d'une charge principale pauvre homogène par jets turbulents générés en amont, au moyen d'une préchambre de combustion. Elle permet la combustion rapide d'un mélange pauvre homogène si elle est correctement dimensionnée [164], ce qui permet d'augmenter le rendement effectif et de diminuer les émissions polluantes du MCI tout en assurant le bon fonctionnement de ce dernier. Il est alors aisé de comprendre les enjeux considérables de la réussite du fonctionnement de cette technologie.

La commercialisation d'une telle technologie ne s'est jamais faite sur des MCI destinés à la propulsion de véhicules. En effet, la conception et la mise au point sur ces MCI fonctionnant à vitesse et charge variables est extrêmement complexe. Elle nécessite de comprendre l'ensemble des mécanismes opérant lors de son utilisation. L'objectif de ce travail de recherche est donc la compréhension du comportement aérothermochimique du milieu réactif lors de l'utilisation d'une telle technologie d'allumage afin d'orienter la conception de cette dernière. Ce travail apporte des données importantes et nécessaires pour la conception de la géométrie de la préchambre générant les jets turbulents ainsi que de la chambre principale. Il apporte également une connaissance des phénomènes physiques opérants nécessaire à la mise au point du MCI.

1.3 CONTEXTE INDUSTRIEL

Le transport est le seul secteur majeur dans l'Europe où les émissions de GES augmentent [62], et ce à cause de l'utilisation en hausse des véhicules. Les motoristes font face à des normes de plus en plus strictes en ce qui concerne les émissions de polluants et aux émissions de CO₂ (directement liées à la consommation de carburant). En 2009, l'union européenne a défini comme objectif une émission moyenne de CO₂ par véhicule constructeur de 130 g/km en 2015 et de 95 g/km en 2021. De plus, les émissions de polluants et la consommation sont des critères utiles à la concurrence. Ces problématiques reçoivent de plus en plus d'attention de la part des consommateurs et des organisations environnementales.

Dans ce contexte, les motoristes travaillent afin de réduire au maximum les émissions et la consommation de leurs produits. Cependant, ils font face à de nombreux verrous technologiques et scientifiques. Pour réussir, ils doivent faire preuve d'audace et d'imagination. Des technologies en rupture sont sans cesse évaluées afin de réussir à diminuer les émissions polluantes ou la consommation des MCI : c'est le cas de la recherche et du développement de la technologie de combustion pauvre avec allumage par jets turbulents qui fait l'objet de ce travail de recherche.

La conception de cette technologie nécessite des essais pour évaluer les paramètres les plus influents et orienter la mise au point et le développement d'un tel système d'allumage. Le recours systématique aux essais expérimentaux pour le design des moteurs s'avère très coûteux et impose des temps de retour très importants. Face à ce constat, et grâce à l'augmentation de la puissance de calcul numérique, la simulation numérique constitue un choix intéressant pour analyser les mécanismes en jeu. Elle s'implante peu à peu au sein des bureaux d'études comme un outil essentiel à la conception et à l'innovation. Il est désormais possible par le biais de la simulation numérique d'orienter les choix de conception vers les solutions les plus efficaces.

1.4 CONTEXTE SCIENTIFIQUE

La simulation numérique des phénomènes aérothermochimique constitue un choix judicieux et efficace pour analyser les mécanismes en jeu lors de l'allumage d'une chambre de combustion par des jets turbulents. Néanmoins, les méthodes de CFD classiquement utilisées dans le domaine automobile sont basées actuellement sur des techniques de type Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) qui ne donnent accès qu'à un cycle moyen en supposant de faibles variabilités cycliques. Les méthodes RANS ne sont pas adaptées à cette étude où les phénomènes instationnaires sont prépondérants et doivent donc être remplacées par des méthodes novatrices dans le domaine des moteurs à pistons : la DNS pour des configurations simplifiées ou la LES pour des configurations complexes (e.g. géométries réelles). Ces méthodes ont le potentiel de prédiction adéquat pour étudier les phénomènes instationnaires (et non statistiquement indépendants du temps) comme les phénomènes d'allumage, de propagation de flamme, d'extinction et d'instabilités par exemple. En effet, de récentes études utilisant la LES ont montré la capacité de cette méthode à capturer les phénomènes acycliques dans les moteurs à allumage commandé [181, 53, 51, 72, 75]. Ce type de calcul instationnaire réalisé dans des géométries complexes nécessite impérativement des codes massivement parallèles, capables de fonctionner sur plusieurs milliers de processeurs [74, 73].

Pour effectuer des simulations numériques d'écoulements fluides réactifs de type DNS ou LES, il faut un code de calcul adapté comprenant :

- une méthode numérique d'ordre élevé en espace et en temps ;
- un couplage avec la thermique des parois en particulier dans la préchambre et autour de l'orifice puisque le flux de chaleur aux parois affecte la flamme ;
- une description de la cinétique chimique fidèle qui puisse prévoir à la fois les vitesses de flamme, les épaisseurs de flamme, les températures de fin de combustion mais également les temps d'auto-inflammation et les réponses à l'étirement et au plissement, dans une gamme étendue de richesse, de pression, de température et de taux de dilution.

Le code AVBP⁴ co-développé par le Centre Européen de Recherche et de Formation Avancée en Calcul Scientifique (CERFACS) et l'Institut Français du Pétrole et des Énergies Nouvelles (IFPEN) est employé pour cela. Ce code est une référence dans le domaine en ce qui concerne les méthodes numériques employées [74]. Le couplage thermique peut être pris en compte à travers un couplage avec le code de thermique AVTP⁵ dans les parois solides à l'aide du logiciel de couplage O-PALM⁶ développé également au CERFACS et à l'Office National d'Études et de Recherches Aérospatiales (ONERA) [125, 45, 44]. Enfin, la cinétique chimique constitue une part essentielle de la simulation : les schémas cinétiques de type Analytical Reduced Chemistry (ARC) peuvent être utilisés afin d'obtenir des schémas compatibles avec la DNS et la LES (environ 20 espèces chimiques transportées et 300 réactions) à partir de schémas

4. <http://www.cerfacs.fr/avbp7x/>

5. <http://www.cerfacs.fr/avtp>

6. http://www.cerfacs.fr/globc/PALM_WEB

détaillés. Cette méthode, développée par le [CERFACS](#) avec l'université de Cornell et de Stanford, permet des simulations [DNS](#) et [LES](#) avec une précision comparable au schéma cinétique détaillé mais à un coût compatible avec un calcul tridimensionnel.

1.5 PLAN DU MANUSCRIT

La première partie du document s'attarde à introduire le projet de recherche dans sa globalité :

- [CHAPITRE 1](#) introduit le contexte et les objectifs de l'étude ;
- [CHAPITRE 2](#) présente la technologie visée par le travail de recherche ;
- [CHAPITRE 3](#) propose un état de l'art des travaux menés sur l'allumage par préchambre ;
- [CHAPITRE 4](#) chapitre 6 présente le plan de travail de l'étude de recherche et de développement.

La deuxième partie du document présente les travaux réalisés pour la caractérisation du comportement d'un jet généré par une préchambre de combustion :

- [CHAPITRE 5](#) propose une étude sur les schémas de cinétique chimique pour l'isooctane utilisées par la suite ;
- [CHAPITRE 6](#) présente les travaux réalisés pour l'établissement de nombres de Peclet critiques pour la propagation d'un front de flamme dans une fente ;
- [CHAPITRE 7](#) présente les travaux réalisés pour l'établissement de nombres de Peclet critiques pour l'allumage d'une chambre à pression constante ;
- [CHAPITRE 8](#) propose une étude des régimes de combustion présents lors d'un allumage par jets turbulents d'une chambre principale de volume constant, ainsi qu'une étude sur l'influence de la position de l'allumage initial ;
- [CHAPITRE 9](#) clos cette deuxième partie en présentant une conclusion de l'étude réalisée et en ouvrant sur des perspectives de travaux à effectuer.

Par ailleurs, une première partie annexe détaille certains travaux complémentaires tandis qu'une deuxième partie annexe présente les fondamentaux théoriques nécessaires à la modélisation des écoulements réactifs par la [LES](#).

 PRÉSENTATION DE LA TECHNOLOGIE

La combustion en mélange pauvre homogène est une voie prometteuse pour la réduction des émissions polluantes tout en améliorant le rendement du MCI. Néanmoins, l'allumage à l'aide d'un dépôt d'énergie par bougie ne peut être réalisé : il donne lieu à des combustions trop lentes¹, à des variabilités cycliques importantes et à des ratés d'allumage.

C'est alors que l'allumage par jets turbulents apporte une solution technologique à ce problème. Correctement dimensionnée, cette technologie a la capacité d'allumer la charge principale avec une faible variabilité cyclique et implique une consommation rapide de la charge principale, palliant aux problèmes d'allumage en mélange pauvre [164]. FIG. 2.1 présente une illustration de l'implémentation d'une technologie d'allumage par jets turbulents sur un moteur à piston, en lieu et place du puits de bougie.

Ce chapitre présente en détail les caractéristiques, les avantages et les inconvénients de :

- la combustion en mélange pauvre homogène (cf. SECTION 2.1);
- l'allumage par jets turbulents d'un mélange pauvre homogène (cf. SECTION 2.2).

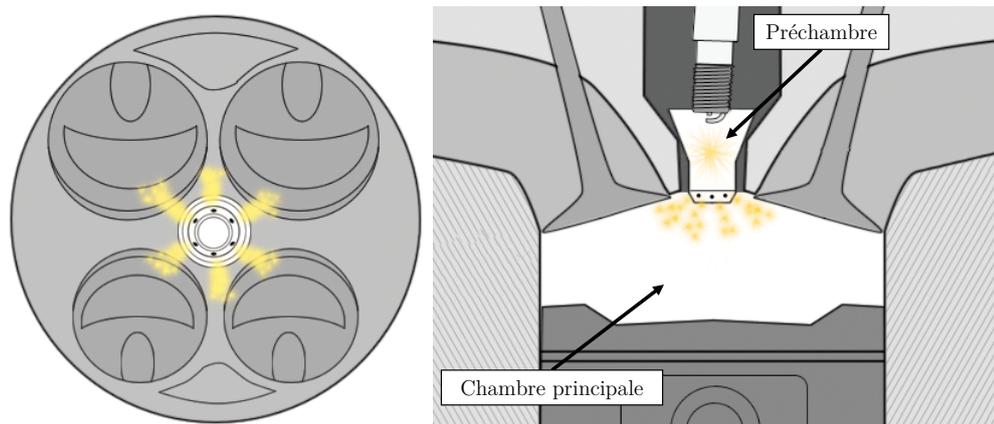


FIGURE 2.1 – Illustration d'une technologie d'allumage par jets turbulents.

2.1 LA COMBUSTION PAUVRE HOMOGENÈME

2.1.1 AVANTAGES

La combustion pauvre homogène possède de nombreux avantages qui sont ici exposés par thématiques.

RENDEMENT EFFECTIF Le rendement effectif (et donc la consommation à charge moteur équivalente) est amélioré via divers processus :

1. Les vitesses de consommation doivent être très importantes à haut régime : il est nécessaire de brûler la charge carburée dans un laps de temps très court (de l'ordre de quelques ms à 3000 tr/min).

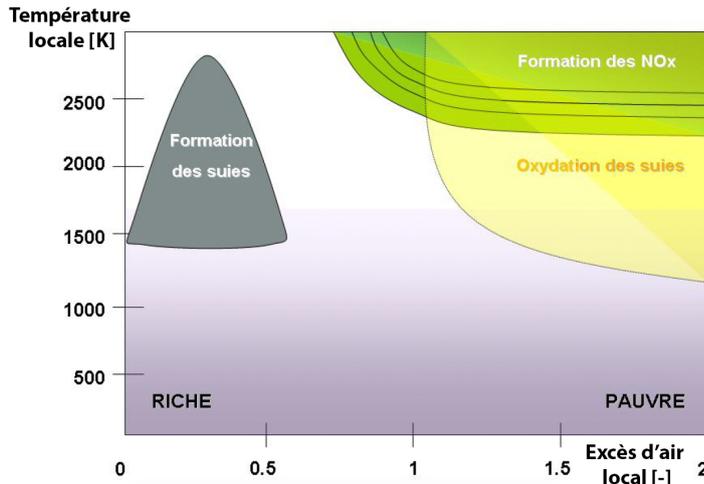


FIGURE 2.2 – Diagramme de Pischninger [134].

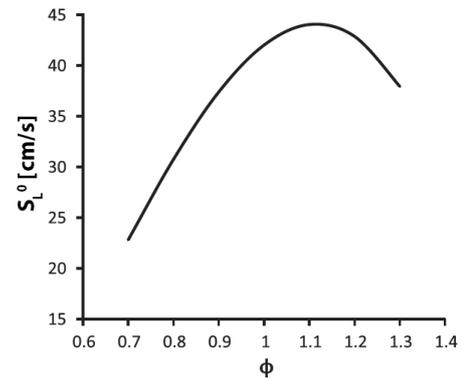


FIGURE 2.3 – Prédiction de vitesse de flamme laminaire d'iso-octane à 298 K et 1 bar [124].

- La diminution des pertes aux parois : les températures de fin de combustion sont moindres en régime pauvre.
- La diminution des pertes par pompages : le fonctionnement avec un vannage à l'admission est limité voire absent.
- L'amélioration du rendement thermodynamique théorique du cycle de Otto défini par EQ. 2.1 via l'augmentation du rapport des capacités calorifiques comme le montre FIG. 2.4.

$$\eta_{Otto} = 1 - \frac{1}{rvc^{\gamma-1}}, \quad (2.1)$$

où γ est le rapport des capacités calorifiques et rvc est le rapport volumétrique de compression :

$$rvc = \frac{V_u + v}{v}, \quad (2.2)$$

avec V_u la cylindrée unitaire et v le volume mort.

ÉMISSIONS POLLUANTES Les émissions de polluants sont très fortement limitées :

- Les particules de suies sont minimisées (cf. FIG. 2.2) : le mélange est pauvre et homogène.
- Les NO_x sont fortement réduits (cf. FIG. 2.2) : la combustion en mélange pauvre donne lieu à des températures de fin de combustion faibles.

2.1.2 INCONVÉNIENTS

La combustion en mélange pauvre possède tout de même quelques inconvénients.

POST-TRAITEMENT EN MILIEU OXYDANT La combustion pauvre nécessite une alternative au post-traitement par catalyse 3 voies classiquement utilisé pour les moteurs à allumage commandé fonctionnant à la stœchiométrie. En effet, seule la catalyse d'oxydation fonctionne en milieu oxydant. Par ailleurs, les températures à l'échappement peuvent être trop faibles pour activer les processus de conversion des HC et des CO . Si le moteur est turbo-compressé, l'énergie cédée par le fluide à la turbine réduit encore la température d'entrée des gaz d'échappement dans le catalyseur. Néanmoins, le développement de contrôle moteur avancé permet de gérer ces problématiques en enrichissant le mélange temporairement si la température des gaz d'échappement à l'entrée du catalyseur devient trop faible par exemple. De plus, les récents développements de la dépollution des moteur diesel en milieu oxydant permettent d'acquérir une certaine confiance quant au post-traitement des gaz brûlés pour le moteur essence fonctionnant en mélange pauvre.

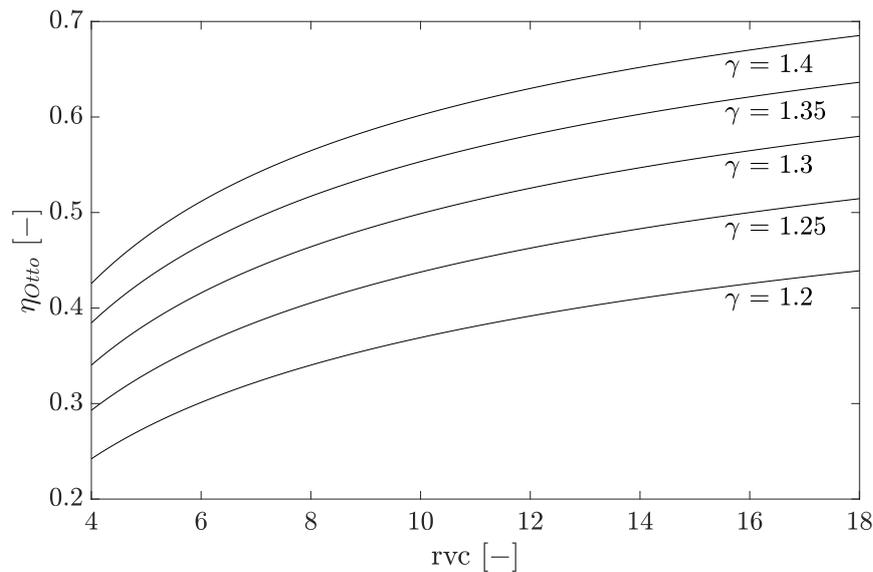


FIGURE 2.4 – Évolution du rendement thermodynamique théorique du cycle de Otto avec le rapport volumétrique de compression pour plusieurs rapports de capacités calorifiques γ .

VARIABILITÉS CYCLIQUES, RATÉS D'ALLUMAGE ET COMBUSTIONS INCOMPLÈTES

- Variabilités cycliques : la combustion pauvre n'est pas robuste, une petite variation des conditions initiales peut entraîner un processus de combustion très différent.
- Ratés d'allumage : fonctionnant proche de la limite d'inflammabilité, la combustion peut être instable et des ratés d'allumage peuvent survenir.
- Combustions incomplètes : elles sont principalement causées par les vitesses de consommation relativement faibles en mélange pauvre qui affectent négativement la vitesse de combustion de la charge principale. En effet, la vitesse de consommation d'une flamme est fortement diminuée avec la diminution de la richesse du mélange dans laquelle elle se propage (cf. FIG. 2.3).

Ces phénomènes posent des problèmes d'agrément moteur, de tenue mécanique, d'efficacité et de pollution. Tout raté d'allumage ou combustion incomplète impliquent une consommation non valorisée de carburant et donnent lieu à des émissions de *HC* élevées dues au rejet d'hydrocarbures imbrulés à l'échappement. Une des solutions pour répondre à ces problématiques est l'amélioration de l'allumage de la charge principale. Cela peut être réalisé en augmentant l'apport énergétique du système d'allumage, en multipliant les sites d'allumage et en intensifiant la turbulence ce qui augmente les vitesses de flamme et facilite la combustion pauvre.

2.2 L'ALLUMAGE PAR JETS TURBULENTS

Pour pallier aux problèmes d'allumage, de stabilité et de vitesse de flamme insuffisante, un allumage de la chambre principale par jets turbulents est possible. TAB. 2.1 présente une comparaison de cette technologie avec les principales technologies de *MCI* actuelles. Cette technologie utilise une pré-chambre pour initier la combustion. La chambre principale est alors allumée par les gaz de la pré-chambre qui pénètrent dans la chambre principale suite au différentiel de pression entre ces deux éléments qui est du à la combustion dans la préchambre. La conception de ce système nécessite que les jets éjectés soient fortement turbulents de façon à ce que la vitesse de flamme soit élevée et à ce que les jets produisent un allumage fiable et intense. Les multiples jets produisent de multiples sites d'allumage ce qui réduit la distance de parcours de flamme et raccourcit encore (en plus de l'effet de la turbulence), la durée de la combustion de la charge principale. Ces processus assurent des durées de combustion faibles et permettant de brûler l'ensemble de la charge carburée dans les délais impartis.

Néanmoins, les régimes de combustion possibles sont multiples et une présentation de ces derniers est disponible [SECTION 2.2.3](#).

2.2.1 AVANTAGES

L'utilisation de ce type d'allumage apporte alors d'autres avantages à la combustion en mélange pauvre :

- Le rendement indiqué est amélioré : la combustion est très rapide et se rapproche d'une combustion isochore ce qui améliore le rendement indiqué.
- Le rendement de cycle thermodynamique peut être augmenté : les durées de combustion faibles repoussent l'apparition des combustions anormales de type cliquetis ce qui permet d'augmenter le rapport volumétrique de compression. L'augmentation du rapport volumétrique de compression a un impact positif sur le rendement thermodynamique théorique du cycle de Otto comme le démontre [EQ. 2.1](#) et [FIG. 2.4](#).
- Les variabilités cycliques sont réduites : la combustion rapide et efficace de la charge diminue les instabilités et les variabilités cycliques.

2.2.2 INJECTION DE CARBURANT AUXILIAIRE

Ces systèmes d'allumage par préchambre peuvent être conçus :

- avec injection de carburant auxiliaire ;
- sans injection de carburant auxiliaire.

L'industrie automobile étant guidée par une logique de coût : le rajout d'un injecteur par préchambre est problématique. Pour cette raison, l'objectif est la conception d'un système d'allumage sans admission de carburant auxiliaire, malgré la conception et la mise au point bien plus complexe.

PRÉCHAMBRE AVEC INJECTION DE CARBURANT AUXILIAIRE Avec une injection de carburant auxiliaire, il est possible d'améliorer le processus de remplissage et de vidange. Une injection en début de compression ou pendant l'admission permet l'évacuation des gaz résiduels de la préchambre qui n'auraient pas été totalement évacués lors de la phase d'échappement. Par ailleurs, l'injection de carburant auxiliaire permet de contrôler la richesse dans la préchambre. Un mélange proche de la stœchiométrie permet d'améliorer l'allumage initial. Un mélange riche permet d'éjecter des produits de combustion incomplète ce qui semble faciliter l'allumage de la chambre principale par effet de réactions chimiques (cf. [SECTION 2.2.3](#)).

PRÉCHAMBRE SANS INJECTION DE CARBURANT AUXILIAIRE Le fait de ne pas utiliser d'injection de carburant auxiliaire dans la préchambre simplifie l'implantation de cette technologie sur une base moteur [SI](#) conventionnelle et diminue son coût. En effet, sans injection auxiliaire, la préchambre est simplement composée d'une cavité et d'une bougie d'allumage. La préchambre est remplie de prémélange durant la phase de compression du cycle moteur par le simple effet du différentiel de pression entre la préchambre et la chambre principale. Néanmoins, les processus de remplissage et de vidange de la préchambre nécessitent une attention particulière puisqu'ils ne peuvent pas être assistés par une injection auxiliaire. Bien que l'implantation du système soit plus simple qu'avec la présence d'un injecteur auxiliaire, la difficulté de la conception et de la mise au point du système est bien plus importante.

2.2.3 LES DIFFÉRENTS MÉCANISMES D'ALLUMAGES POSSIBLES

Après l'allumage du mélange dans la préchambre, la chambre principale est allumée par de multiples jets turbulents générés par la combustion dans la préchambre. Ces jets peuvent être :

- réactifs : la flamme n'est pas éteinte à la traversée de l'orifice ;
- non-réactifs : la flamme est éteinte par pertes thermiques à la paroi lors de la traversée de l'orifice.

	SI	Diesel	HCCI	Jets turbulents
Technologie requise	Bougie d'allumage, injection directe ou indirecte, catalyseur 3 voies	Injection directe, dépollution avancée pour les PM ou les NO_x	Levée et calage variable des soupapes, bougie d'allumage, injection directe, contrôle moteur avancé, catalyse 3 voies à la stoechiométrie, dépollution avancée pour les NO_x	Bougie d'allumage, injection indirecte, catalyse 3 voies à la stoechiométrie, catalyse d'oxydation en mélange pauvre
Émissions	Faibles émissions avec simple catalyse 3 voies	Traitement spécifique des NO_x et PM à l'aide de filtre à particules, de piège à NO_x , de technologie SCR	Traitement spécifique des NO_x	Basse émission de NO_x et de PM , catalyse 3 voies et/ou catalyse d'oxydation suffisante
Rendement	Rendement moindre	Rendement élevé	Proche du rendement diesel	Proche du rendement diesel
Plage de fonctionnement	Élevée	Élevée	Élevée si turbo-compressé	Semble être limité
Économie de carburant sur cycle	-	Jusqu'à 30% d'économie par rapport à un moteur SI	Jusqu'à 15% d'économie par rapport à un moteur SI	Jusqu'à 20% d'économie par rapport à un moteur SI
Contrôle moteur	Le plus simple	Contrôle moteur complexe pour assurer la dépollution	Contrôle moteur très complexe afin d'assurer les différents modes de fonctionnement et les transitions	Si un unique mode de fonctionnement : similaire au moteur SI Sinon : contrôle moteur très complexe afin d'assurer les différents modes de fonctionnement et les transitions
Bruit moteur	Le moins bruyant	La combustion génère du bruit : des stratégies de contrôle moteur sont là pour limiter ces émissions de bruit	Similaire au moteur diesel	<i>A priori</i> similaire au moteur SI
Fiabilité	Très fiable	Fiable	En R&D	En R&D
Cout	Le moins couteux	Très couteux à cause des systèmes de dépollution	Entre le diesel et le moteur SI	<i>A priori</i> entre le diesel et le moteur SI

TABLE 2.1 – Comparaison du système d'allumage par jets turbulents avec les technologies actuelles. Adapté de [173]

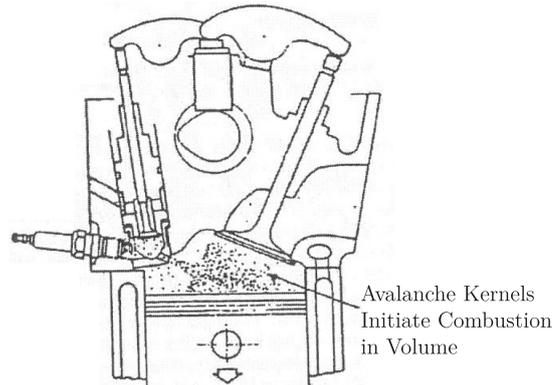


FIGURE 2.5 – Schéma du processus LAG « *avalanche activation of combustion* » [80].

Lorsque la flamme est éteinte, la chambre principale reçoit alors des produits de combustion incomplète contenant des espèces chimiquement actives (radicaux actifs). Ces espèces dissociées peuvent provoquer l'allumage du mélange principal à distance du débouché de l'orifice de la préchambre, par des processus chimiques et/ou thermiques. Ce type d'allumage utilise le concept de réactions chimiques en chaîne introduit par Nikolai Semenov dans les années 1930 [163]. Il est appelé Lavinia Aktyvatsia Gorenia (LAG) en Russe par le scientifique Gussak Lev Abramovich. Les études de Gussak *et al.* [80, 81] et de Yamaguchi *et al.* [190] montrent l'importance des radicaux actifs dans le processus d'allumage par préchambre. Par ailleurs, l'utilisation de mélange riche dans la préchambre semble être bénéfique à la génération des radicaux actifs. Les géométries utilisant ce processus de combustion se distinguent par leurs orifices plus petits (*cf.* FIG. 2.5) ce qui implique une extinction de la flamme à travers l'orifice mais des vitesses d'éjection très élevées. Ces vitesses élevées permettent au jet de pénétrer plus profondément dans la chambre de combustion principale et de se mélanger efficacement. Gussak *et al.* [80] préconisent l'utilisation de préchambre d'un volume de l'ordre de 2 à 3 % du volume de la chambre principale, un orifice de l'ordre de 0.03 à 0.04 cm² par cm³ de volume de préchambre et un rapport longueur/diamètre de 1/2 pour l'orifice.

TAB. 2.2 présente une classification des différents allumages possibles proposée par Yamaguchi *et al.* [190] qui est utilisée afin d'orienter l'étude et d'expliquer les phénomènes observés. Yamaguchi *et al.* concluent sur le fait que le régime (ii) *Composite ignition* est le plus favorable à l'allumage de mélange pauvre. FIG. 2.6 présente les limites d'inflammabilité du mélange en fonction du diamètre de l'orifice, les classifications de Yamaguchi *et al.* y sont également reportées. 3 aspects semblent jouer au premier ordre sur l'allumage et la combustion de la chambre principale : la température des jets, la présence de radicaux actifs et la turbulence. Selon la conception du système, ces aspects sont plus ou moins prépondérants et dictent les mécanismes d'allumage.

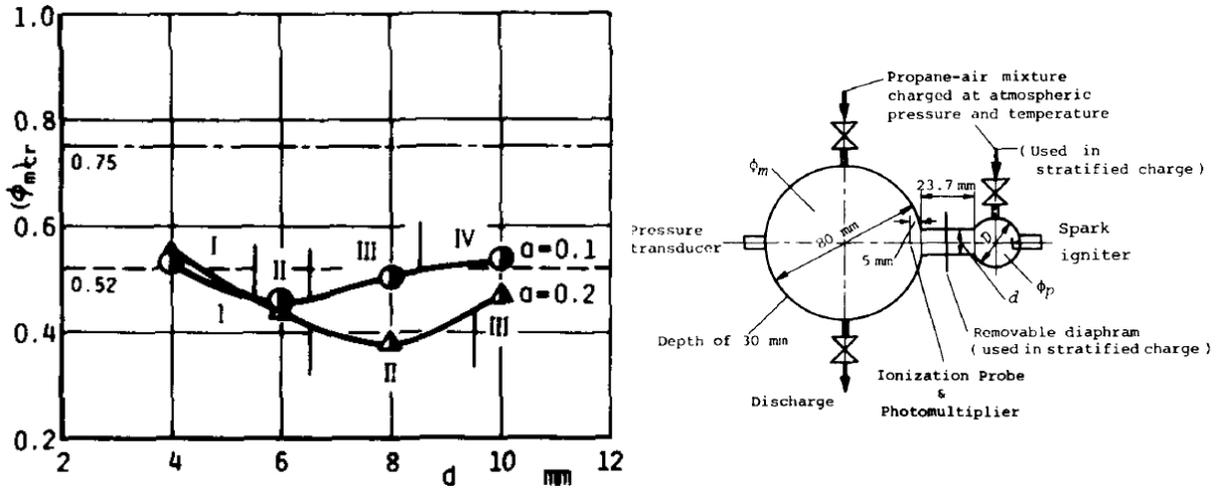


FIGURE 2.6 – Gauche : limite pauvre de flammabilité pour différents diamètre d’orifice pour un rapport de volume de 0.1 et de 0.2. Droite : schéma de l’expérimentation de Yamaguchi *et al.* [190].

(i) « *Well dispersed burning* » : Ce régime intervient lorsque la taille des orifices est très petite : une extinction de flamme a lieu et les gaz sont fortement refroidis à la traversée des orifices. Des espèces dissociées à température modérée sont alors injectées dans la chambre principale. Ces radicaux actifs sont mélangés au gaz frais et entraînent des réactions en chaîne jusqu’à, après un délai d’inflammation, la combustion du mélange. Dans ce régime, les effets de la température sur l’allumage sont mineurs.

(ii) « *Composite ignition* » : Les orifices sont légèrement plus importants que (i) : une extinction de flamme a lieu et les gaz sont légèrement refroidis à la traversée des orifices. Des espèces dissociées à température élevée sont injectés dans la chambre principale. Le mélange de ces gaz avec les gaz frais de la chambre principale provoquent un allumage « hybride » par effets de température et de réactions chimiques en chaîne dues aux radicaux actifs.

(iii) « *Flame kernel torch ignition* » : Les orifices sont légèrement plus importants que (ii) ce qui permet de ne pas réaliser d’extinction de flamme. Cependant, ils sont toujours assez petits pour que les jets réactifs soient éjectés avec intensité ce qui génère des effets turbulents. Des flammes turbulentes sont alors créées dans la chambre principale et l’allumage est dû à la présence de ces flammes turbulentes dans l’enceinte.

(iv) « *Flame front torch ignition* » : La taille des orifices est la plus importante. La flamme de la préchambre se propage dans la chambre principale et l’allumage se fait par propagation de front de flamme. Le différentiel de pression entre la préchambre et la chambre principale est faible ce qui n’implique pas d’effet d’éjection important.

TABLE 2.2 – Classification des différents régimes d’allumage proposée par Yamaguchi *et al.* [190].

Comme il est exposé [CHAPITRE 2](#), la combustion en mélange pauvre homogène dans les [MCI](#) requiert un allumage très énergétique et une combustion fortement turbulente afin de réussir à allumer le mélange et à le brûler dans les délais impartis. Une revue de systèmes innovants permettant l'allumage en mélange pauvre est proposée par [\[38, 173, 37\]](#). Il est possible de réaliser une liste non exhaustive de ces systèmes :

- allumage par bougie haute énergie ;
- allumage par laser ;
- allumage par micro-onde ;
- allumage photochimique ;
- allumage par jet de plasma ;
- allumage assisté par hydrogène ;
- allumage par préchambre.

Ce chapitre présente une revue des principaux systèmes d'allumage par préchambre de combustion seulement. Ces systèmes d'allumage peuvent être caractérisés en fonction de plusieurs paramètres :

- le volume de la préchambre ;
- la taille des orifices connectant la préchambre à la chambre principale ;
- le nombre d'orifices connectant la préchambre à la chambre principale ;
- l'alimentation ou non de la préchambre en carburant.

Les préchambres de faible volume ont l'avantage d'induire de faibles pertes thermiques aux parois et de réduire les émissions d'hydrocarbures imbrulés en raison du faible volume de la cavité et de la faible surface des parois. Pour cette raison, seul ces types de préchambre sont ici présentés.

3.1 HISTORIQUE

L'allumage de la chambre principale à l'aide d'une chambre auxiliaire dans les moteurs à allumage commandé est une invention de Harry Ralph Ricardo [\[154, 175\]](#) datant de la première partie du [XX^{ème}](#) siècle. Le concept consiste en la mise en place d'une chambre auxiliaire avec admission de carburant auxiliaire (cf. [FIG. 3.1](#)) dans laquelle la combustion est initiée. Le mélange riche est allumé par une bougie d'allumage et allume à son tour le mélange pauvre de la chambre principale. Ce concept, comme beaucoup d'inventions de Harry Ralph Ricardo, est source d'inspiration pour de nombreux motoristes comme Summers [\[167\]](#), Mallory [\[122\]](#), Bagnulo [\[8\]](#), Barnes [\[10\]](#), Oppenheim [\[133\]](#), Pouring [\[151\]](#), etc. Des exemples de géométries sont présentés [FIG. 3.3](#).

Aujourd'hui, il existe de nombreux systèmes de préchambre de combustion appliqués sur des moteurs à pistons stationnaires de grande cylindrée. Néanmoins, les systèmes de préchambre n'ont jamais réussi à pénétrer le marché du moteur [SI](#) pour la propulsion à l'exception des concepts (avec injection de carburant auxiliaire) Honda CVCC [\[89\]](#) (cf. [FIG. 3.3b](#)) et Porsche SKS [\[67\]](#) (cf. [FIG. 3.3c](#)) dans les années 1970. Ils ont ensuite été abandonnés pour des technologies moins complexes et moins coûteuses. Néanmoins, le coût des systèmes de dépollution actuels et les normes à venir rendent cette technologie de nouveau intéressante pour les motoristes.

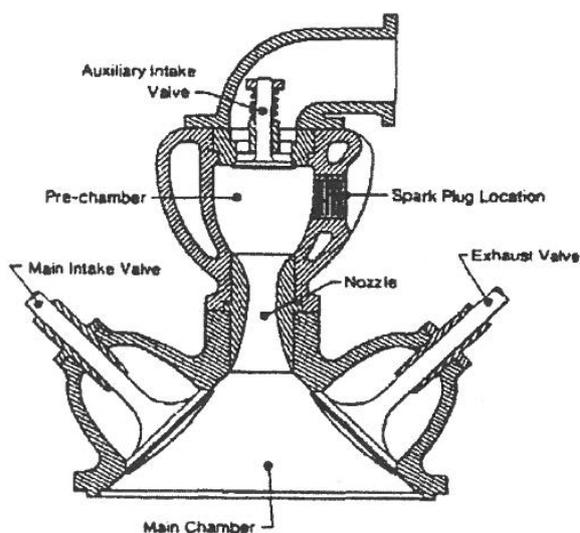


FIGURE 3.1 – Culasse du moteur Ricardo à charge stratifiée [176].

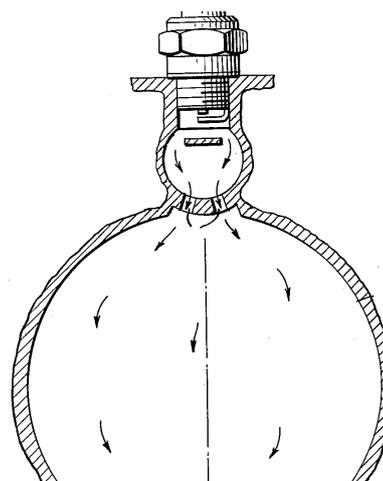


FIGURE 3.2 – Concept de Goossak D. A. [71].

3.2 REVUE DE DIFFÉRENTES TECHNOLOGIES

3.2.1 CHAMBRE DIVISÉE AVEC INJECTION DE CARBURANT AUXILIAIRE

Ce type de technologie se caractérise par :

- une stratification de la charge à l'aide d'une injection de carburant auxiliaire ;
- un large orifice liant la préchambre à la chambre principale.

Le différentiel de pression entre la préchambre et la chambre principale est faible et le type de combustion est proche d'une combustion par front de flamme. Le mélange riche ou stœchiométrique dans la préchambre permet d'être facilement allumé sans bougie particulière. Les technologies Honda CVCC FIG. 3.3b [39], Broderson FIG. 3.3g [20], Heintz FIG. 3.3d [83], Porsche SKS FIG. 3.3c [66] et General Motors FIG. 3.3e [189] sont des exemples de ce type de technologie.

3.2.2 ALLUMAGE PAR JETS TURBULENTS AVEC INJECTION DE CARBURANT AUXILIAIRE

Ce type de technologie se caractérise par :

- une stratification de la charge à l'aide d'une injection de carburant auxiliaire ;
- de petits orifices liant la préchambre à la chambre principale ;
- un volume de préchambre relativement faible (2 à 3 % du volume mort).

Les petits orifices impliquent des vitesses d'éjections élevées et la création de jets turbulents. De sorte à éviter à ce que les jets impactent les murs de la chambre de combustion, le volume de la préchambre doit rester assez faible.

L'équipementier automobile MALHE est très avancé en ce qui concerne cette technologie [4, 5, 6, 7]. La technologie, nommée « *Turbulent Jet Ignition* », est développée pour être applicable sur de nombreux moteurs sans changement majeur sur la structure de ces derniers. En effet, le système remplace simplement la bougie d'allumage (cf. FIG. 3.4). Malheureusement, le système est composé d'un injecteur supplémentaire par cylindre ce qui augmente le coût d'intégration. Quelques caractéristiques majeures peuvent être listées :

- le volume de la préchambre est très petit (environ 2% du volume de la chambre principale), ce qui minimise la production d'hydrocarbures imbrulés, les pertes aux parois et les gaz résiduels ;
- la préchambre est connectée à la chambre principale par plusieurs petits orifices (environ 1.25 mm de diamètre) ;
- la richesse dans la préchambre est contrôlée par un injecteur auxiliaire ;

- l’injecteur auxiliaire assiste la vidange de la préchambre des gaz résiduels ;
- le carburant introduit dans la préchambre est identique à celui présent dans la chambre principale ;
- l’allumage de la préchambre se fait par bougie d’allumage.

L’allumage réside sur l’éjection turbulente des gaz de la préchambre : l’allumage de la chambre principale est assuré par des processus thermiques, chimiques et de mélanges turbulents. Il réside sur le même principe LAG de Gussak *et al.* [80, 81] (allumage type (i) ou (ii) cf. TAB. 2.2) : la flamme est éteinte lors de la traversée des orifices et l’allumage se fait par réactions chimiques en chaîne. La plage de fonctionnement de cette technologie MALHE se trouve être identique à celle des moteurs SI conventionnels. Le fonctionnement du MCI en transitoire est également assuré. Cette technologie permet le fonctionnement du moteur sans vannage à l’admission sur une certaine plage de fonctionnement : la charge est directement régulée via l’injection. FIG. 3.6 présente des résultats d’essais sur un point stabilisé : la limite de stabilité (fixée à 10 % de covariance sur la Pression Moyenne Indiquée (PMI)) est très largement repoussée et le rendement est fortement augmenté. La dilution atteint un facteur d’air $\lambda = 2$ tout en maintenant une stabilité de combustion adéquate. L’amélioration maximale du rendement effectif est de l’ordre de 11%. Cette amélioration peut être encore plus importante avec l’utilisation de rapport volumétrique de compression plus élevés qui sont permis par l’augmentation de la rapidité de la combustion de la charge principale (*i.e.* limite au cliquetis repoussée). Les émissions de NO_x sont de l’ordre de grandeur de la partie par millions ce qui ne nécessite pas de traitement particulier. Le traitement des HC et des CO est possible à l’aide de catalyse d’oxydation si la température à l’entrée du catalyseur est suffisamment élevée.

3.2.3 AUTO-INFLAMMATION PILOTÉE PAR INJECTION DE RADICAUX

Ce concept permet de piloter l’auto-inflammation d’un moteur HCCI en injectant des radicaux dans la charge principale. Il a notamment été étudié par l’université d’Orléans [157, 34] au début des années 2000. Il comporte une préchambre de combustion riche qui génère des produits de combustion après allumage par bougie. Ces produits de combustion sont éjectés dans la chambre principale par de nombreux petits orifices (environ 10 trous plus petit que 1 mm de diamètre) qui permettent :

- de couper toute réaction de combustion ;
- d’empêcher la réapparition d’une flamme dans le vortex des jets ;
- de distribuer les radicaux dans toute la chambre afin d’obtenir un mélange le plus homogène possible.

Les radicaux présents dans la charge principale amorcent l’auto-inflammation par des processus chimiques, ce qui permet de piloter l’auto-inflammation. Ce concept est très prometteur et permet d’apporter une solution au pilotage de l’allumage des moteurs HCCI.

En 2003, Kojic *et al.* étudie un principe similaire avec un allumage par compression du mélange de la préchambre [98, 99]. Un système de soupapes est de pistons est mis en place pour l’allumage par compression de la préchambre. L’allumage par compression permet de s’affranchir des problèmes de ratés d’allumage parfois rencontrés avec un allumage par bougie. Néanmoins, il implique la conception d’un système complexe.

3.2.4 COMBUSTION HOMOGENÈME AVEC INJECTION DE RADICAUX DU CYCLE PRÉCÉDENT

En 2007, le concept de « *Homogeneous Combustion Radical Ignition* » [15, 16] naît. Ce concept est similaire au concept « Auto-inflammation Pilotée par injection de Radicaux » à la seule différence qu’il utilise des radicaux d’un cycle moteur précédent pour allumer le cycle en cours plutôt que de générer des radicaux à l’aide d’une combustion en préchambre. La technologie est composée de plusieurs chambres auxiliaires connectées à la chambre principale par de petits conduits. La difficulté de la gestion d’une telle technologie réside dans la capture et le stockage de gaz brûlés du cycle précédent. La conception du système est complexe, ce qui freine son application.

3.2.5 ALLUMAGE PAR JET ASSISTÉE À L'HYDROGÈNE

Cette technologie utilise un processus d'allumage par préchambre avancé qui implique la combustion d'hydrogène dans la préchambre de combustion [183, 184]. Un injecteur auxiliaire d'hydrogène est placé dans la préchambre pour cela. La charge d'hydrogène injectée ne dépasse pas 2 % de l'énergie totale mais suffit à allumer la charge principale de façon très efficace. Les espèces chimiquement actives, en addition des hauts niveaux de turbulence présents dans les jets, impliquent des niveaux d'énergie plus de deux fois supérieurs à un allumage par bougie. La limite de combustion pauvre peut être étendue à $\lambda=5$ avec de l'essence en carburant principal [120]. Cependant, l'hydrogène est difficile à stocker et la gestion d'un carburant additionnel est complexe. Pour ces raisons, cette technologie n'a pas été appliquée sur des MCI destinés à la propulsion. Aujourd'hui, sur des MCI fonctionnant au gaz naturel, des motoristes travaillent sur le reformage de l'hydrogène à partir du carburant pendant le cycle moteur, afin d'alimenter une préchambre en hydrogène sans le besoin de le stocker.

3.2.6 ALLUMAGE PAR JETS TURBULENTS SANS INJECTION DE CARBURANT AUXILIAIRE

La réussite de la conception de ce type de technologie est l'objectif du projet de recherche dans lequel ce document s'inscrit. Ce type de technologie se caractérise par :

- une charge parfaitement homogène ;
- un système d'injection indirecte ;
- l'utilisation de bougie haute énergie ;
- de petits orifices liant la préchambre à la chambre principale.

FIG. 3.5 et FIG. 3.2 présentent deux exemples de ce type de technologie.

Au cours des années 1980, Latsch *et al.* [106] réussit à simplifier le système de jets turbulents avec injection de carburant (SECTION 3.2.2) : il élimine l'injection auxiliaire de carburant dans la préchambre. Le remplissage de la préchambre est assuré par le prémélange de la chambre principale et le mouvement du piston lors de la phase de compression. La préchambre de Latsch *et al.* est une préchambre composée de 5 orifices (4 tangents, 1 central) créant un mouvement de swirl dans la préchambre lors du remplissage et facilitant la combustion dans cette dernière. Une étude de Bowling *et al.* [18] montre que malgré le fait que ce système produit de forts taux de dégagement de chaleur, les gaz résiduels coincés dans la préchambre sont problématiques. Le système étudié échoue à repousser la limite d'allumage en mélange pauvre par rapport à un moteur SI conventionnel. D'autres études de Toyota [131] (cf. FIG. 3.3a), Ford [2] et Volkswagen [19] sont réalisées sur cette technologie.

Plus récemment, des systèmes équivalents ont été étudiés par Caterpillar en 1992 [156], General Motors en 1995 [47], l'université de Karlsruhe en 1999 [186], Delphi en 2001 [48] et Nissan en 2007 [101] (liste non exhaustive). Aujourd'hui, cette technologie intéresse de nombreux motoristes puisqu'elle permettrait, sous condition d'une conception minutieuse, d'allumer un mélange pauvre sans la mise en place d'injection auxiliaire et sans le besoin d'un système d'injection directe. Néanmoins, un travail de recherche est nécessaire afin d'optimiser au mieux le comportement des jets ainsi que le remplissage et la vidange de la préchambre. Par ailleurs, l'allumage de la préchambre doit se faire avec une bougie haute énergie afin de réussir à initier une combustion pauvre homogène dans cette dernière.

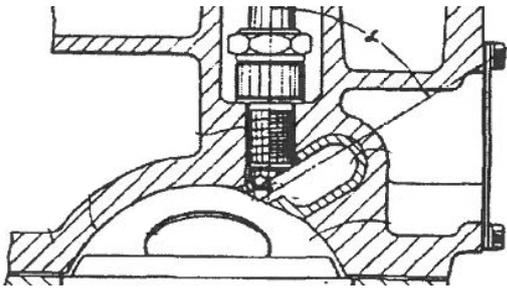
3.2.7 ALLUMAGE PAR PRÉCHAMBRE ET PISTON BOL

Latsch *et al.* [185, 96] complète le principe d'allumage par jets turbulents en stratifiant la charge sans injecteur additionnel. FIG. 3.7 présente un schéma de la préchambre et une description du fonctionnement du processus. Cette technologie est composée d'une bougie d'allumage logée dans une cavité, un injecteur placé dans la chambre de combustion principale (injection directe) et un piston formé d'un bol permettant le mouvement aérodynamique nécessaire au remplissage de la préchambre. L'injection est réalisée en deux temps :

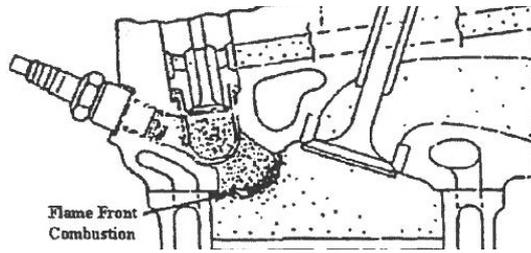
- la première, pendant la phase d'admission, assure la charge principale homogène ;

- la seconde ($\sim 3\%$ de la masse totale), en fin de compression, est effectuée dans le bol du piston de sorte à ce que le carburant soit transporté vers la préchambre à l'aide du seul mouvement aérodynamique créé.

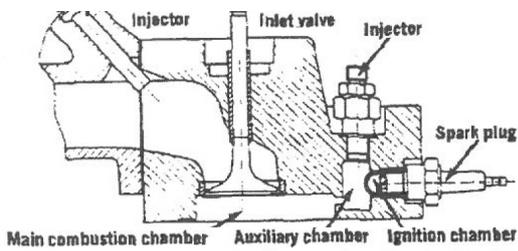
Par la suite, le mélange de la préchambre est allumé à l'aide de la bougie d'allumage présente dans la cavité, créant de multiples jets turbulents qui pénètrent dans la chambre de combustion principale et allument le mélange pauvre. Ce processus innovant permet de bénéficier d'une charge stratifiée facilitant l'allumage sans l'ajout d'un injecteur supplémentaire par cylindre. Malheureusement, tout comme l'allumage par jets turbulents sans injection de carburant auxiliaire, il souffre de problème de vidange des gaz résiduels dans la préchambre. De plus, l'injection directe tardive et le mélange stratifié créent des zones de richesse hétérogène et/ou implique la présence de gouttes de carburant liquide, ce qui pose des problèmes d'émission polluantes.



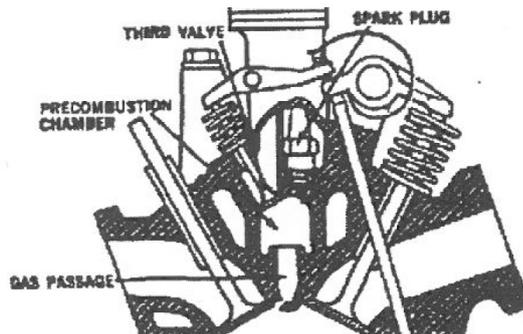
(a) Toyota « Turbulence Generating Pot Torch Cell » [131, 160].



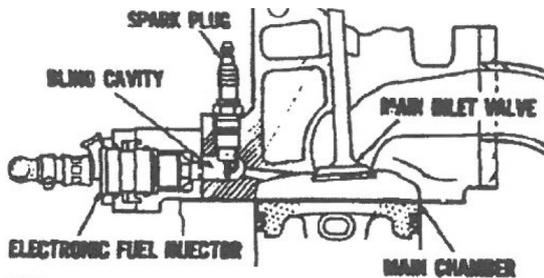
(b) Honda CVCC [39].



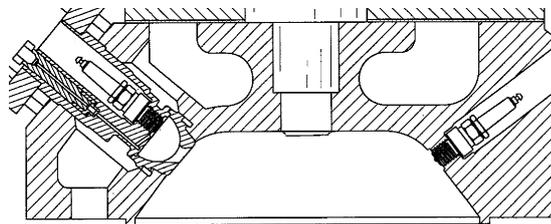
(c) Porsche SKS [66].



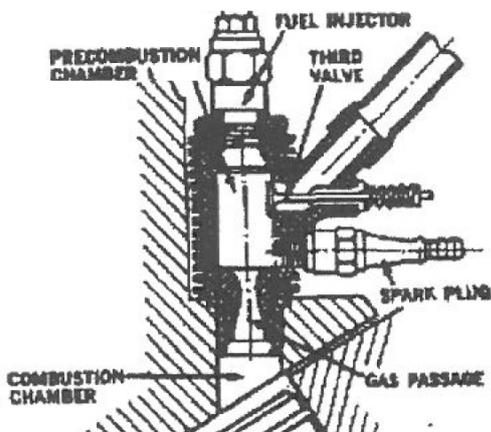
(d) Heintz « Ram Stratified Engine » [83].



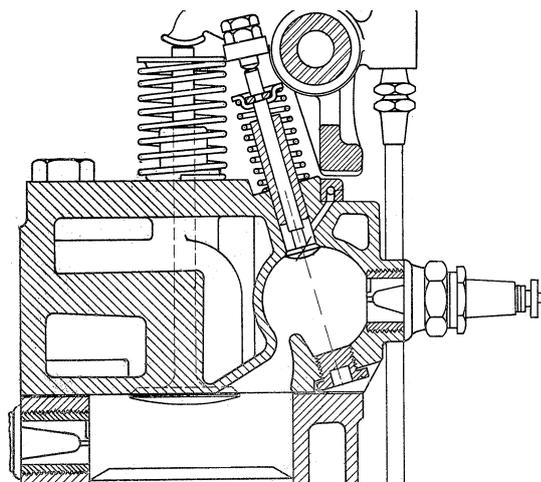
(e) General Motors « Electronic Fuel Injection » [189].



(f) Pouring [151].



(g) Broderson « Conta Engine » [20].



(h) Summers [167].

FIGURE 3.3 – Exemples de géométries de préchambre de combustion.



FIGURE 3.4 – Image numérique d’un système de préchambre MALHE [4].

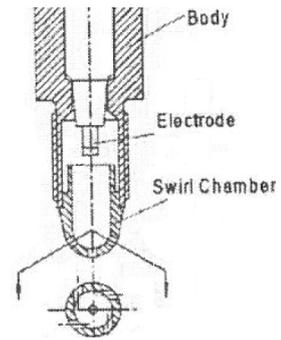
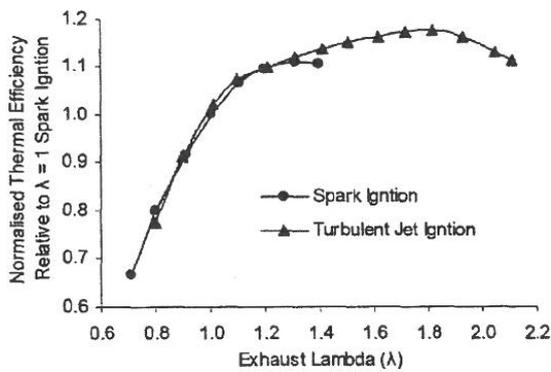
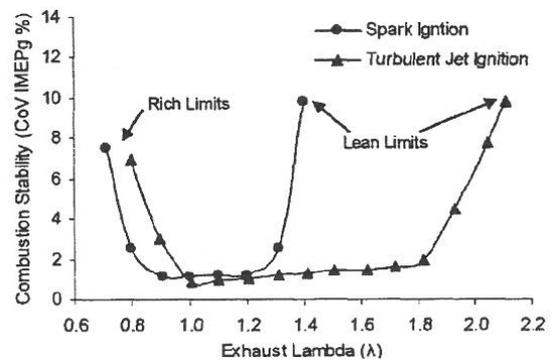


FIGURE 3.5 – Schéma d’une préchambre de combustion sans carburant auxiliaire [18].

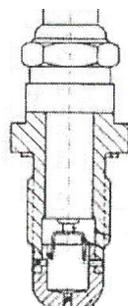


(a) Efficacité thermique relative à un moteur SI conventionnel à $\lambda = 1$ en fonction de l’excès d’air.

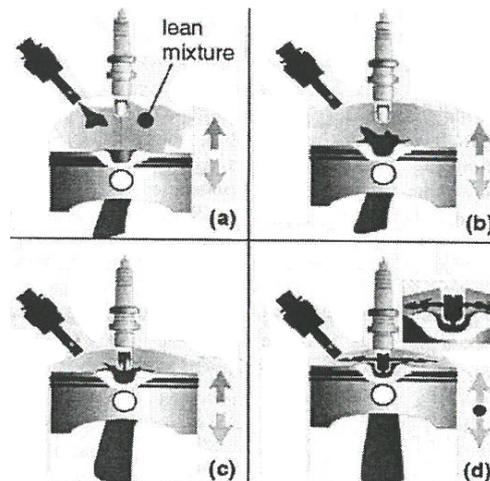


(b) Stabilité de la combustion en fonction de l’excès d’air.

FIGURE 3.6 – Comparaison entre moteur SI conventionnel et technologie « Turbulent Jet Ignition » (avec injection de carburant auxiliaire) à 1500 tr/min et 3,3 bar de PMI [4].



(a) Schéma de la pré chambre utilisée.



(b) Description du processus : injection principale pendant la phase de compression, mélange air/carburant principal, transport du mélange vers la pré-chambre et allumage par jets turbulents.

FIGURE 3.7 – « Bowl Prechamber Ignition concept » [96]

PROBLÉMATIQUE ET PLAN DE TRAVAIL

L'objectif du projet de recherche et de développement dans lequel ce document s'inscrit est la conception et la mise au point de la technologie présentée [CHAPITRE 2](#), sans injection de carburant auxiliaire (cf. [CHAPITRE 3](#) pour une présentation des principales technologies d'allumage par préchambre). Ce travail de recherche par le biais de simulations numériques avancées permet d'analyser les mécanismes en jeu et d'orienter la conception. [SECTION 1.3](#) et [SECTION 1.4](#) présente le contexte de l'étude qui n'est pas rappelé ici. Ce chapitre présente la problématique et le plan de travail mis en œuvre afin d'apporter des éléments de réponse à cette dernière.

4.1 DESCRIPTION DE LA PROBLÉMATIQUE

Le développement de moteurs à allumage commandé de nouvelle génération basés sur la combustion pauvre avec allumage par jets turbulents nécessite l'étude des phénomènes physiques conditionnant l'allumage de la chambre principale. La problématique de l'allumage est une problématique générique de nombreuses situations rencontrées en combustion. En sécurité électrique par exemple, dans le cas où un gaz inflammable envahit une pièce, une flamme initiée par une étincelle dans un boîtier électrique (une préchambre) ne doit pas parvenir à enflammer la pièce (chambre principale) où se trouve le boîtier. Dans le cas de l'allumage par jets turbulents, l'objectif est inverse : il faut enflammer la chambre principale de façon efficace. Néanmoins, les mécanismes restent les mêmes et peuvent se résumer à l'énoncé générique suivant : « ayant allumé une première flamme dans une petite chambre, et sachant que cette chambre est séparée d'un grand volume par de petits orifices, dans quelle condition la combustion va-t-elle démarrer ou ne pas démarrer dans ce grand volume ? ». Pour répondre à cette question, [FIG. 4.1](#) présente la configuration académique retenue composée d'une préchambre et d'une chambre principale liées par un simple orifice. Afin d'étudier les mécanismes et de comprendre la physique mise en jeu, il est nécessaire d'étudier le système sur des cas académiques simplifiés dans un premier temps.

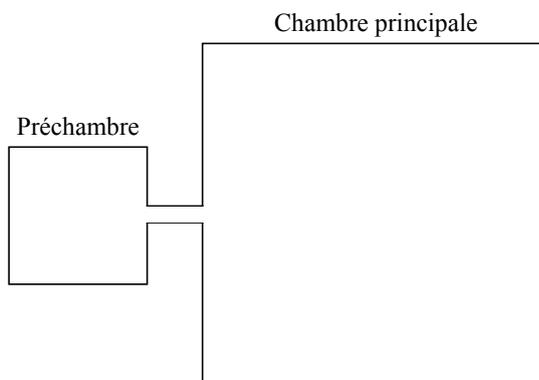


FIGURE 4.1 – Géométrie du problème académique de référence.

Il convient de séparer deux mécanismes globaux bien distincts qui peuvent mener à l'allumage de la chambre principale.

1. La flamme peut sortir de l'orifice sans être éteinte et enflammer la chambre principale.

2. Même si la flamme est totalement éteinte à cause des transferts thermiques aux parois, il n'en reste pas moins que le système va injecter des gaz brûlés et des espèces dissociées dans la chambre principale. Une combustion peut alors apparaître à nouveau, plus tard, comme décrit dans le régime LAG de Gussak *et al.* [80, 81] (ou allumage type (i) ou (ii) de Yamaguchi *et al.* [190] cf. TAB. 2.2). Le mécanisme d'allumage est alors un mécanisme de réactions chimiques en chaîne tel que décrit par Nikolai Semenov [163], plus ou moins assisté par la température.

Se limiter à examiner la sortie de la flamme par l'orifice n'est pas suffisant. Il faut considérer le problème dans sa globalité (pré-chambre, conduit et chambre principale) pour évaluer la probabilité d'allumage de la chambre principale. De plus, si l'orifice est de petite taille, la pression dans la pré-chambre peut rapidement devenir plusieurs fois plus grande que la pression dans la chambre principale, menant à un jet supersonique suivi d'un système de chocs à la sortie de l'orifice. La capacité de ce jet à allumer une flamme dans la chambre principale devient alors plus délicate à évaluer puisque les chocs augmentent la température locale et favorisent l'allumage.

En opposition, plusieurs mécanismes peuvent expliquer l'échec de l'allumage de la chambre principale :

- **M1** Les pertes thermiques au passage de l'orifice peuvent affaiblir la flamme de sorte à l'éteindre complètement comme on l'observe dans les dispositifs dit « arrête-flamme » où une flamme pré-mélangée peut être éteinte si on l'oblige à se propager dans un tube de diamètre inférieur à un certain seuil [136]. L'extinction n'est néanmoins pas une condition suffisante pour l'échec de l'allumage de la chambre principale. Les gaz brûlés éjectés peuvent réussir à initier une combustion dans la chambre principale (cf. « *well dispersed burning* » et « *Composite ignition* » TAB. 2.2).
- **M2** L'interaction du jet avec la turbulence peut être défavorable à l'allumage, et ce pour plusieurs raisons :
 1. Le jet peut se mélanger trop rapidement avec les gaz frais et ne pas induire la thermique nécessaire à la combustion. En effet, le rapport entre le temps caractéristique de mélange (*i. e.* l'échelle intégrale de temps de la turbulence τ_t ¹) et le temps chimique τ_c ² (évalué par le nombre de Damköhler $Da = \tau_t / \tau_c$) peut favoriser le mélange avant la réaction chimique. C'est le cas si $\tau_t \ll \tau_c$, ce qui peut être le cas lors de mouvement de grande échelle de type *swirl* ou *tumble* dans les moteurs à mélange pauvre où les vitesses de flamme sont faibles et les épaisseurs de flamme importantes (*i. e.* un temps caractéristique de la chimie τ_c important). Ainsi le mélange peut être trop rapide devant la chimie.
 2. La flamme présente peut être très fortement affaiblie par la turbulence : le rapport de temps entre le temps chimique τ_c et le temps caractéristique des plus petites échelles de la turbulence τ_k ³ (évalué par le nombre de Karlovitz $Ka = \tau_c / \tau_k$) peut provoquer l'extinction locale d'une flamme par effets de plissement et d'étirement ou de mélange de petite échelle trop rapide. Il est donc possible d'assister à un régime d'interaction flamme/turbulence défavorable à la combustion et tendant vers une extinction totale de la flamme.
 3. Par ailleurs, l'écoulement peut venir plaquer la flamme contre une paroi, provoquant ainsi une extinction par pertes thermiques.
- **M3** : Le jet débouchant peut être découpé en éléments de plus petite taille, plus petits que la taille critique de propagation d'un noyau prémélangé [103] [28]. En effet, le jet est de petite taille quand il pénètre dans la chambre principale : ceci le rend fragile vis-à-vis de la turbulence présente dans cette chambre. Dans ce cas, ces éléments de flamme seront incapables de se propager.

Dans les cas réels, c'est la combinaison de tous les mécanismes qu'il faut considérer. De plus, la flamme se développe dans un milieu stratifié où se mélangent les gaz frais mais aussi les gaz résiduels du cycle précédent ce qui peut, de surcroît, affaiblir la combustion.

1. $\tau_t = k/\epsilon$ avec k l'énergie cinétique du champ fluctuant et ϵ le taux de dissipation de l'énergie cinétique du champ fluctuant.
 2. τ_c peut être estimé par le rapport entre l'épaisseur δ_L^0 et la vitesse S_L^0 de flamme laminaire. C'est le temps requis pour que la flamme se propage d'une distance égale à sa propre épaisseur thermique.

3. $\tau_k = (\nu/\epsilon)^{1/2}$ où ν est la viscosité cinématique du mélange et ϵ le taux de dissipation de l'énergie cinétique du champ fluctuant.

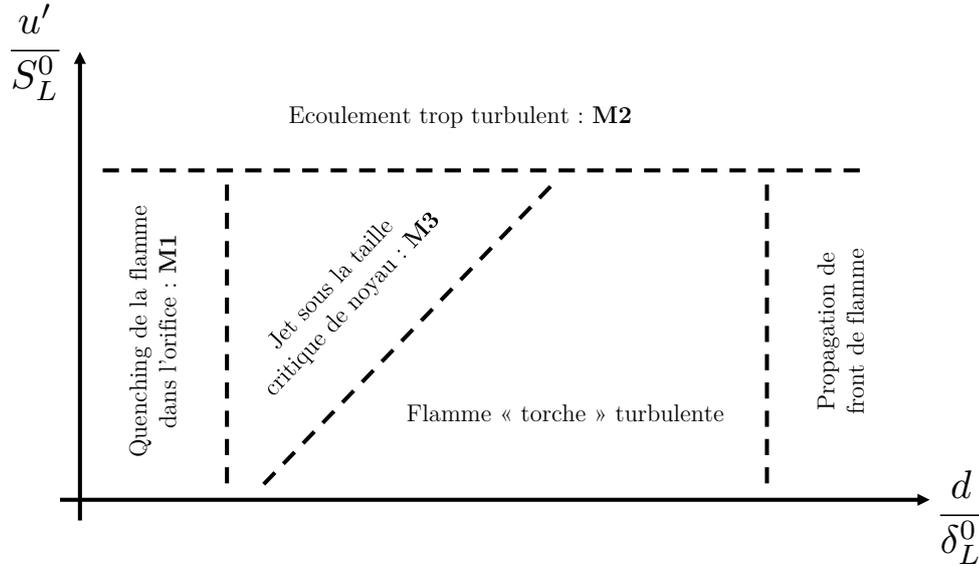


FIGURE 4.2 – Diagramme *a priori* prédisant l’allumage de la chambre principale en fonction de paramètres adimensionnés. $\frac{u'}{S_L^0}$: rapport entre la fluctuation de vitesse due à la turbulence et la vitesse de flamme laminaire. $\frac{d}{\delta_L^0}$: rapport entre la taille de l’orifice et l’épaisseur de flamme laminaire.

4.2 PLAN DE TRAVAIL

L’ensemble du travail de recherche numérique est réalisé en parallèle d’essais expérimentaux au sein du groupe Renault et de laboratoires partenaires. Une approche purement théorique visant à identifier les mécanismes importants et donc les nombres sans dimension qui contrôlent le comportement de l’allumage de la chambre principale est également menée. La théorie est nécessaire mais la simulation numérique de type **DNS** et **LES** est indispensable pour établir les limites exactes et vérifier les concepts théoriques. En cela, la combinaison de la théorie avec la **DNS**, la **LES** et l’expérimental est une des caractéristiques du travail de recherche et de développement de cette technologie.

Dans un premier temps, il s’agit d’étudier les allumages par jets turbulents, le *quenching* de flamme dans les conduits, la combustion turbulente à haut nombre de Karlovitz, l’interaction flamme/paroi, l’interaction flamme/turbulence et l’extinction dans des configurations académiques. Dans ce cadre, des calculs sont effectués sur des géométries de chambre schématisées (e.g. FIG. 4.1) : c’est à dire des cas de moteur idéalisé permettant de développer la théorie et les calculs de façon épurée, afin d’identifier les mécanismes principaux.

FIG. 4.3 présente l’organisation des travaux sous forme d’un schéma. Cette étude permet d’appréhender le comportement d’un jet de gaz réactif ou non-réactif débouchant dans une enceinte en fonction de divers paramètres comme la taille de l’orifice ou la nature de l’écoulement présent dans l’enceinte. L’idée est de prévoir le succès ou l’échec de l’allumage de la chambre principale en fonction de paramètres adimensionnels comme le rapport entre la taille de l’orifice et l’épaisseur de flamme et le rapport entre une échelle de vitesse turbulente dans la chambre et la vitesse de flamme (cf. FIG. 4.2). L’influence de la richesse du mélange et du rapport de volume entre les chambres doit également être évaluée. De plus, la caractérisation du régime de combustion intervenant lors de l’allumage de la pré-chambre est important pour définir l’efficacité de l’allumage. Toute cette étude se veut générique, c’est à dire faite sur un cas académique simplifié. Elle comprend :

- Une étude de la propagation d’un front de flamme dans une fente afin d’établir des ordres de grandeur de taille permettant la propagation.
- Une étude d’un système de préchambre académique réalisée à pression chambre principale constante afin d’évaluer la capacité du système de préchambre à éjecter un jet réactif assez robuste pour allumer la chambre principale.

- Une étude d'un système de préchambre académique réalisée à volume constant qui permet d'évaluer les interactions complexes entre la préchambre, le conduit et la chambre principale ainsi que les régimes de combustion présents en fonction de la géométrie et des conditions initiales. Par ailleurs, certains cas étudiés sont réalisés avec une chimie [ARC](#) afin d'appréhender l'influence de la description de la chimie sur le processus de combustion.

Les cinétiques chimiques utilisées sont présentées et validées au préalable de la présentation des travaux les utilisant. Par ailleurs :

- [ANNEXE A](#) présente un modèle oD développé afin d'estimer l'évolution de la pression dans la préchambre au cours du temps lorsque la pression chambre principale peut être supposée constante.
- [ANNEXE B](#) propose la validation d'une chimie [ARC](#) pour le propane. Cette chimie sera utilisée par la suite afin de réaliser une étude approfondie et quantitative du cas de Yamaguchi *et al.* [190]. Pour des raisons de comparaison avec les données de Yamaguchi *et al.*, elle est réalisée avec du propane comme carburant.
- [ANNEXE C](#) à [ANNEXE H](#) présente les concepts théoriques associés à modélisation des écoulements réactifs par la simulation aux grandes échelles de la turbulence.

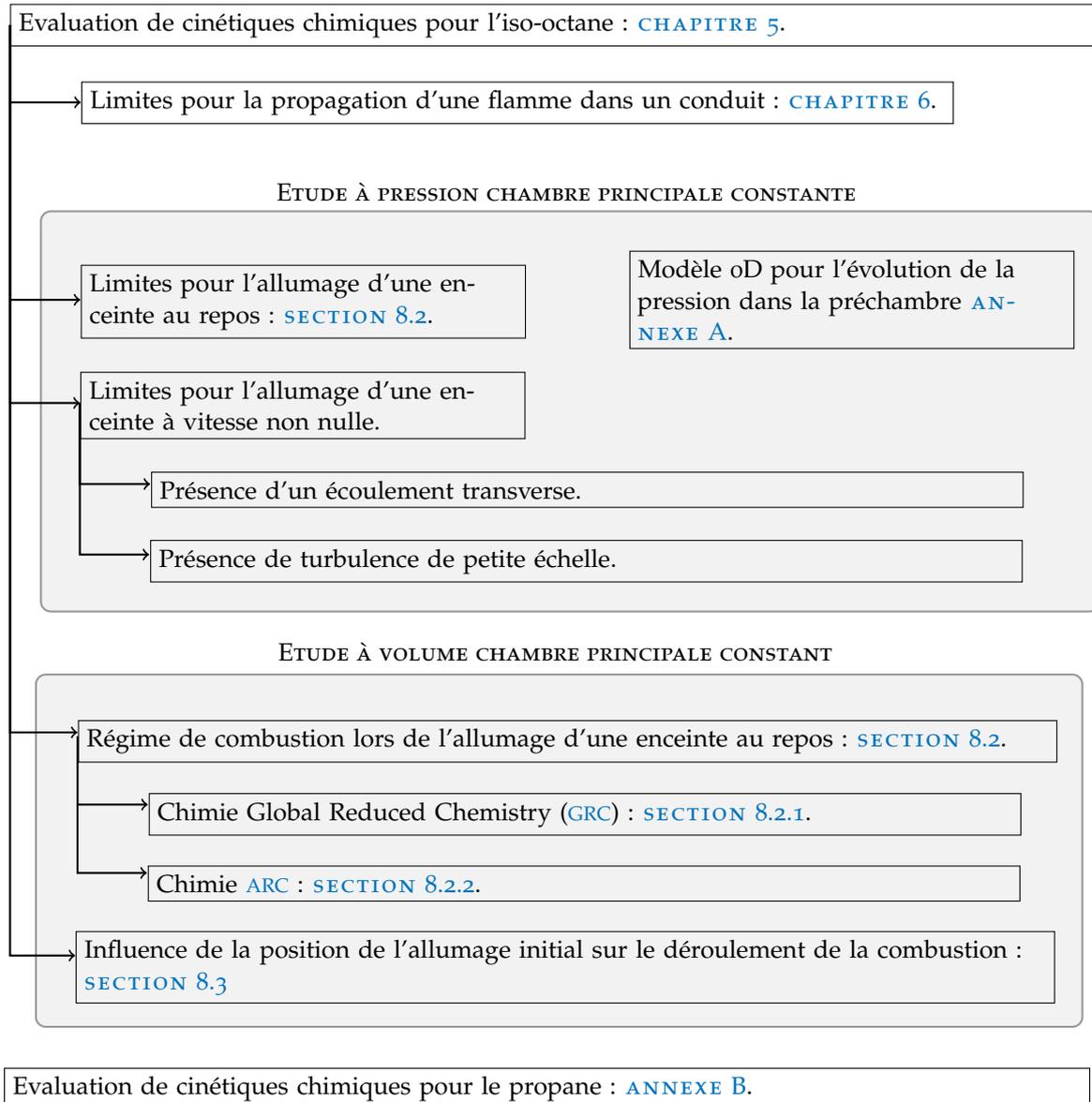


FIGURE 4.3 – Schéma synthétique de l'organisation des travaux.

Deuxième partie

CARACTÉRISATION PRÉLIMINAIRE DU COMPORTEMENT
D'UN ALLUMAGE PAR JETS TURBULENTS

 ÉTUDE PRÉLIMINAIRE DE LA CHIMIE DE L'ISO-OCTANE

Le principal composé de l'essence est l'iso-octane, c'est la molécule de référence utilisée pour simuler la combustion dans les moteurs à essence. Elle est donc choisie comme carburant¹ pour la réalisation de cette partie. Des schémas de cinétique chimique pour l'iso-octane sont alors nécessaires afin de décrire la chimie de la combustion. Avant d'utiliser de tels schémas il est indispensable d'évaluer la validité des grandeurs d'intérêt primordiales comme la vitesse de consommation, l'épaisseur de flamme thermique et la température adiabatique de fin de combustion. Le cas étudié [CHAPITRE 8](#) présente des phénomènes d'auto-inflammation assistés par mélange de radicaux et réactions chimiques en chaîne : il est alors impératif d'étudier le comportement du schéma de cinétique chimique utilisé face à ces processus.

Le schéma de cinétique chimique choisi comme référence pour l'iso-octane est le schéma détaillé de Jerzembeck *et al.* [91]. Il comporte 107 espèces et 601 réactions et décrit la cinétique chimique d'un mélange arbitraire de n-heptane, ethanol et iso-octane. Le mécanisme est basé sur les réactions du mécanisme PRF du même auteur [92] et les réactions liées à l'éthanol de *Marinov et al.* [1]. Ce mécanisme a montré des accords satisfaisants avec des mesures expérimentales de mélanges n-heptane / iso-octane et de mélanges n-heptane / iso-octane / ethanol à 10 et 20 bar et à une température initiale de 373 K. De même pour de l'éthanol pur à 1 bar 300 K et à 10 bar 373 K.

[ANNEXE G](#) présente les différents niveaux de description de la cinétique chimique possibles ainsi que leurs spécificités. Pour des raisons de concision, ces détails ne sont pas répétés ici. [TAB. 5.1](#) présente un tableau des différents schémas de cinétique chimique pour l'iso-octane utilisés dans cette étude.

- [FIG. 5.1](#), [FIG. 5.2](#) et [FIG. 5.3](#) présentent les vitesses de consommation, les épaisseurs de flamme thermiques et les températures adiabatiques de fin de combustion issues de simulations de flamme 1D CANTERA [70] utilisant les chimies présentées [TAB. 5.1](#). Les simulations GRC utilisent un modèle de transport équivalent au modèle de transport utilisé dans AVBP. Les conditions initiales évoluent selon une compression isentropique des gaz frais à partir de 1 bar 300 K avec $\gamma = 1.4$ et ce afin de représenter les conditions de pression et de température rencontrées en fin de compression dans un moteur à pistons.
- [FIG. 5.4](#) présente les délais d'auto inflammation basés sur $\max(|\overrightarrow{grad}(T)|)$ obtenus avec le schéma GRC 2S_BE2 et avec le schéma cinétique détaillé de référence pour :
 - 3 conditions de pression : $P = 1, 2$ et 3 bar ;
 - 3 conditions de richesse : $\phi = 1, 0.8$ et 0.6 ;
 - 7 conditions de température initiale : $T_{init} = 900, 1000, 1100, 1200, 1300, 1400$ et 1500 K.
 Ces délais d'auto inflammation sont obtenus à l'aide de simulations CANTERA [70] de réacteur homogène 0D à pression constante.
- [FIG. 5.5](#) présente les délais d'auto inflammation basés sur $\max(\dot{\omega}_{OH})$ obtenus avec le schéma ARC « SPK_21_219_11_QM » et avec le schéma cinétique détaillé de référence pour les mêmes conditions de pression, de richesse et de températures que [FIG. 5.4](#). Ces délais d'auto inflammation sont également obtenus à l'aide de simulations CANTERA [70] de réacteur homogène 0D à pression constante.
- [FIG. 5.6](#) présente les délais d'inflammation obtenus à la suite d'un mélange de gaz frais et de gaz brûlés dans un réacteur homogène utilisant les chimies « SPK_21_219_11_QM » et le schéma cinétique détaillé de référence. La composition des gaz frais et des gaz brûlés, la pression et la

1. En réalité, l'essence est un mélange d'hydrocarbures et d'additifs. Néanmoins, l'isooctane est un bon *surrogate* de l'essence.

SCHÉMA	NOMBRE D'ESPÈCES TRANSPORTÉES	NOMBRE D'ESPÈCES QSS	NOMBRE DE RÉACTIONS	SOURCE
JERZEMBECK	107	-	601	[91]
SPK	48	-	416	ICARE *
SPK_21_219_11_QM	21	11	219	CERFACS
2S_BE2	6	-	2	[50]
2S_AB	6	-	2	[17]

* P. Dievart, G. Dayma et F. Halter. CNRS-ICARE, UPR 3021, 1C avenue de la Recherche scientifique, 45071 ORLEANS.

TABLE 5.1 – Tableau des schémas de cinétique chimique utilisés pour l'iso-octane.

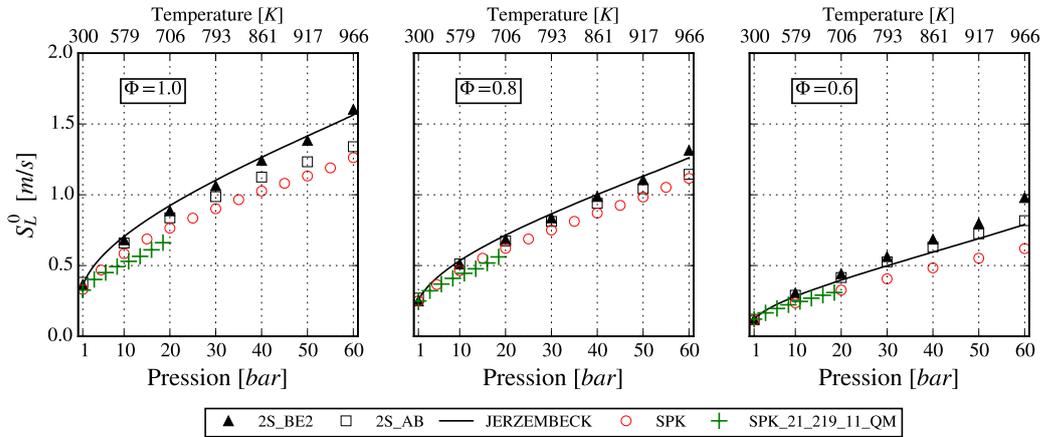


FIGURE 5.1 – Vitesses de flamme laminaire d'un mélange iso-octane/air issues de simulations de flamme 1D CANTERA [70]. La température initiale évolue avec la pression selon une compression isentropique avec $\gamma = 1.4$.

température initiale sont choisies de sorte à reproduire le cas d'étude [CHAPITRE 8](#) dans lequel la préchambre et la chambre principale est à $\phi = 1.0$ et les conditions de pression et de température initiales sont de 1 bar et de 300 K. Les simulations sont telles que :

- Les gaz frais sont un mélange iso-octane/air à $\phi = 1.0$, $T = 300$ K et $P = 1$ bar.
- Les gaz brûlés sont issus d'une combustion iso-octane/air à pression constante à $\phi = 1.0$, $T_{init} = 300$ K et $P_{init} = 1$ bar.
- Les gaz frais et les gaz brûlés sont mélangés selon une fraction massique de gaz brûlés Y_b définie par :

$$Y_b = \frac{m_b}{m_t}. \quad (5.1)$$

- La composition initiale du mélange est donnée par la conservation de la masse :

$$Y_k = Y_b \cdot Y_{k,b} + (1 - Y_b) \cdot Y_{k,u}. \quad (5.2)$$

- La température initiale du mélange T_{mix} est connue à l'aide d'un bilan d'enthalpie :

$$h(T_{mix}) = Y_b \cdot h_b(T_b) + (1 - Y_b) \cdot h_u(T_u). \quad (5.3)$$

Les délais d'inflammation τ_I sont définis comme le temps pour lequel le taux de production de OH est maximal et sont obtenus à l'aide de simulation CANTERA [70] de réacteur homogène oD à pression constante.

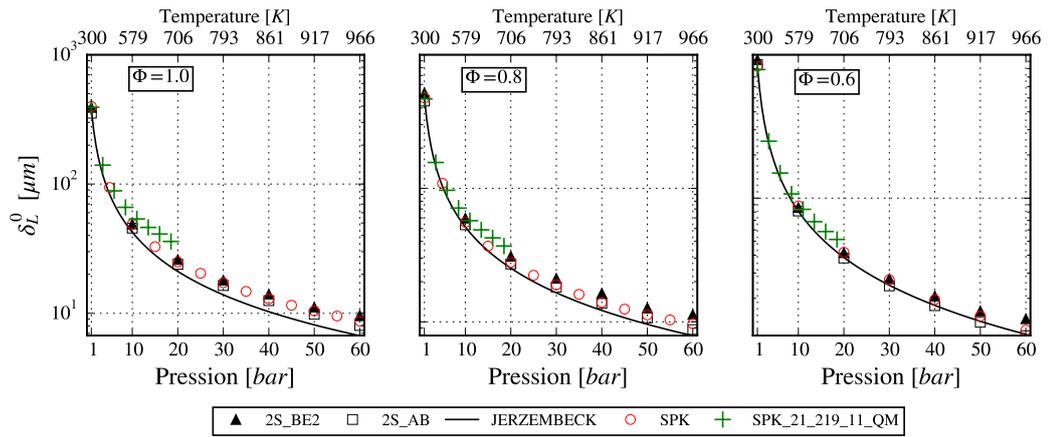


FIGURE 5.2 – Epaisseurs de flamme laminaire d'un mélange iso-octane/air issues de simulations de flamme 1D CANTERA [70]. La température initiale évolue avec la pression selon une compression isentropique avec $\gamma = 1.4$.

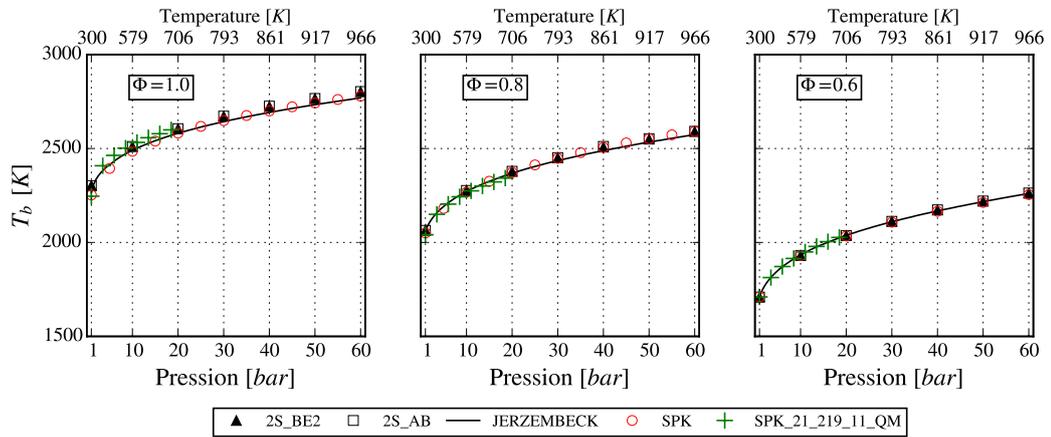


FIGURE 5.3 – Températures adiabatiques de fin de combustion de flamme laminaire d'un mélange iso-octane/air issues de simulations de flamme 1D CANTERA [70]. La température initiale évolue avec la pression selon une compression isentropique avec $\gamma = 1.4$.

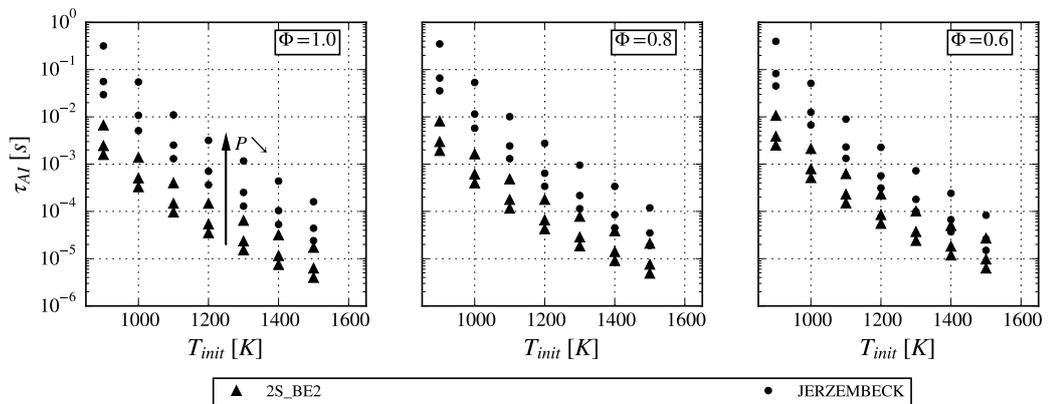


FIGURE 5.4 – Délais d'auto-inflammation τ_{AI} d'un mélange iso-octane/air basés sur $\max(|\overrightarrow{grad}(T)|)$ issus de simulations de réacteur homogène oD à pression constante CANTERA [70]. $P = 1, 5$ et 10 bar.

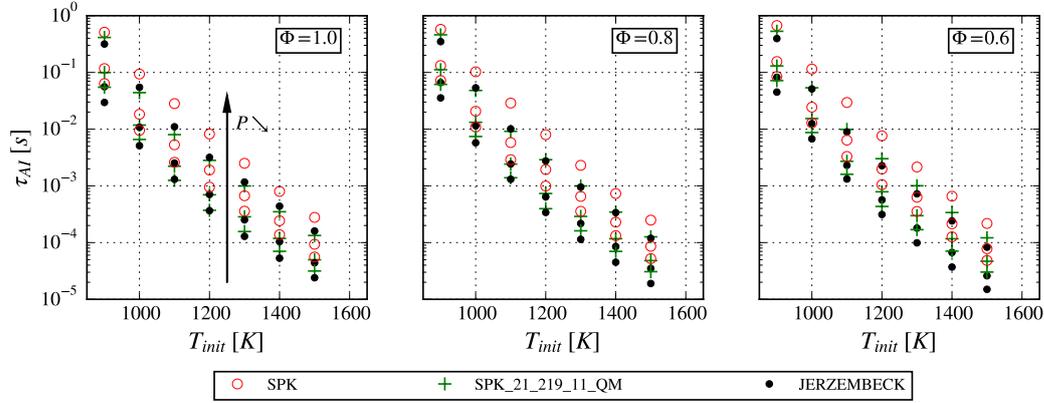


FIGURE 5.5 – Délais d’auto-inflammation τ_{AI} d’un mélange iso-octane/air basés sur $\max(\dot{\omega}_{OH})$ issus de simulations de réacteur homogène oD à pression constante CANTERA [70]. $P = 1, 5$ et 10 bar.

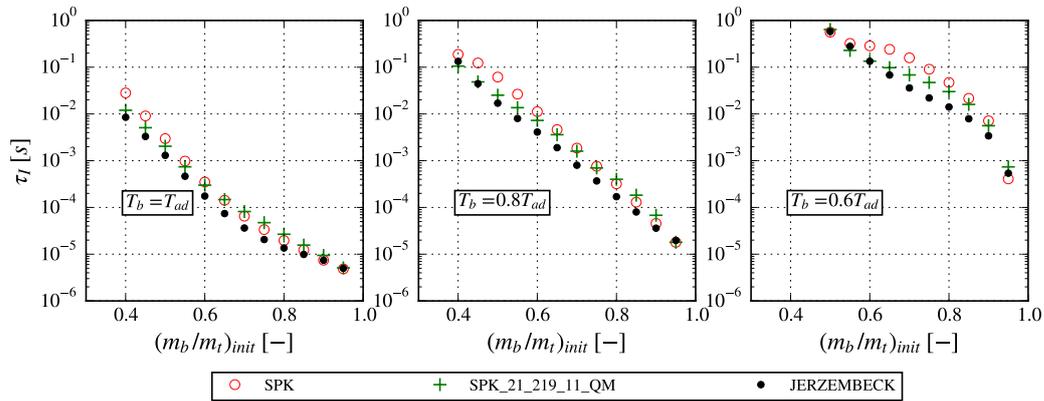
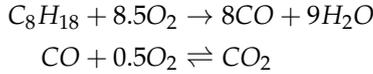


FIGURE 5.6 – Délais d’inflammation τ_I basés sur $\max(\dot{\omega}_{OH})$ suite à un mélange de gaz brûlés (composition issue d’une combustion à pression constante d’un mélange iso-octane/air à $P_{init} = 1$ bar, $T_{init} = 300$ K et $\phi = 1.0$) et de gaz frais (propane/air à $P = 1$ bar, $T = 300$ K et $\phi = 1.0$). Simulation de réacteur homogène oD à pression constante par CANTERA [70]. $P = 1$ bar.

5.1 CHIMIE GLOBALEMENT RÉDUITE

Au cours de cette étude, les schémas GRC (voir SECTION G.3) 2 étapes et 6 espèces 2S_BE2 [50] et 2S_AB [17] sont utilisés afin d'évaluer en première approche les différents mécanismes physiques présents dans les cas étudiés. Les 2 réactions s'écrivent :



seul les coefficients des lois d'Arrhenius sont différents entre ces deux schémas GRC.

VITESSE DE FLAMME, ÉPAISSEUR DE FLAMME ET TEMPÉRATURE ADIABATIQUE DE FIN DE COMBUSTION Les vitesses de consommation des deux schémas GRC sont en bonne adéquation avec le schéma cinétique détaillé de référence. Le schéma 2S_AB sous estime tout de même la vitesse de consommation à forte pression à la stœchiométrie (cf. FIG. 5.1). Pour cette raison, le schéma 2S_BE2 sera préféré au schéma 2S_AB pour les simulations GRC. En ce qui concerne l'épaisseur de flamme laminaire et la température adiabatique de fin de combustion, les deux schémas GRC sont en très bonne adéquation avec le schéma cinétique détaillé de référence (cf. FIG. 5.2 et FIG. 5.3).

DÉLAIS D'AUTO-INFLAMMATION Les délais d'auto-inflammation sont sous-estimés de plus d'un ordre de grandeur ce qui rend ce type de schéma inutilisable sur des applications où les phénomènes d'auto-inflammation sont primordiaux (cf. FIG. 5.4). En effet, les schémas GRC ne contiennent pas la physique de la cinétique chimique. Ils sont bâtis afin de reproduire les vitesses de consommation, les épaisseurs de flamme et les températures de fin de combustion d'un schéma cinétique détaillé dans le cas d'une flamme plane laminaire non plissée et non étirée par la turbulence. Ces schémas peuvent alors s'éloigner de la réponse d'un schéma cinétique complexe dans des cas trop éloignés d'une flamme plane laminaire. C'est le cas par exemple de la réponse à l'étirement d'une flamme, des délais d'auto-inflammation d'un mélange, des délais d'inflammation suite à un mélange de gaz brûlés et de gaz frais, etc.

5.2 MÉCANISME SQUELETTE

Un schéma dit « *skeletal mechanism* » (voir SECTION G.4) est utilisé afin de réduire la chimie détaillée avant application d'une méthode ARC ou pour utilisation directe. Ce schéma est nommé « SPK » et est composé de 48 espèces et de 416 réactions. Il a été dérivé par Dievart *et al.* du laboratoire ICARE d'Orléans. Son domaine de validité théorique est tel que $0.8 < \Phi [-] < 1.4$, $1 < P [\text{atm}] < 10$ et $298 < T [\text{K}] < 473$.

VITESSE DE FLAMME, ÉPAISSEUR DE FLAMME ET TEMPÉRATURE ADIABATIQUE DE FIN DE COMBUSTION Malgré son domaine de validité théorique réduit, le schéma prédit des vitesses de consommation, des épaisseurs de flamme laminaire et des températures adiabatique de fin de combustion tout à fait cohérentes avec la cinétique chimique détaillée de référence à $\Phi = 0.6$ et à basse pression ($P < 20$ bar) (cf. FIG. 5.1, FIG. 5.2 et FIG. 5.3). Cependant, le schéma « SPK » sous estime de façon assez prononcée la vitesse de consommation à forte pression ($P > 20$ bar), et ce quel que soit la richesse du mélange.

DÉLAIS D'AUTO-INFLAMMATION Les délais d'auto-inflammation sont légèrement surestimés sur l'ensemble des cas étudiés (cf. FIG. 5.5). Malgré une erreur présente, les tendances sont respectées et les délais sont dans l'ordre de grandeurs des délais obtenus avec le schéma de référence.

DÉLAIS D'INFLAMMATION À LA SUITE D'UN MÉLANGE DE GAZ FRAIS ET DE GAZ BRÛLÉS De façon identique aux délais d'auto-inflammation, les délais d'inflammations suite à un mélange de gaz frais et de gaz brûlés (cf. FIG. 5.6) sont légèrement surestimés tout en restant dans l'ordre de grandeur des délais obtenus avec le schéma de référence.

Φ	1.0	0.8	0.6
Erreur moyenne S_L^0	-0.216	-0.140	-0.108
Erreur maximale S_L^0	-0.284	-0.208	-0.194
Erreur moyenne δ_L^0	0.235	0.105	0.059
Erreur maximale δ_L^0	0.6	0.376	0.250
Erreur moyenne T_b	0.010	-0.004	0.000
Erreur maximale T_b	0.013	-0.008	0.002

TABLE 5.2 – Erreur relative moyenne et maximale du schéma « SPK_21_219_11 » par rapport au schéma de référence (Jerzembeck [91]) sur sa plage de validité théorique (cf. SECTION 5.3). Erreur = $(qte - qte^{ref}) / qte^{ref}$ avec qte la quantité d'intérêt.

5.3 CHIMIE ANALYTIQUEMENT RÉDUITE

Un schéma ARC noté « SPK_21_219_11 » est dérivé à partir du schéma « SPK » et présenté. Le schéma a été dérivé à l'aide de l'outil YARC [139]. La méthodologie et les concepts théoriques sont présentés SECTION G.5.

- Les hydrocarbures C_5H sont écartés du schéma : ils provoquent des difficultés au bon déroulement du processus de réduction.
- Seule la conservation de la vitesse de flamme laminaire a été fixée comme objectif lors du processus. Les cas canoniques de références sont des flammes 1D à pression constante pour 9 conditions différentes :
 - $\Phi = 1, 0.8$ et 0.6 ;
 - $P = 1, 5$ et 10 bar ;
 - la température des gaz frais évolue avec la pression selon une compression isentropique avec $\gamma = 1.4$ à partir de 300 K à $P = 1$ bar.
- La plage de validité est théoriquement de $0.6 < \Phi [-] < 1.0$, $1 < P [\text{bar}] < 10$ et $T_u = T_1 \cdot (P_1/P)^{(1-\gamma)/\gamma}$ avec $P_1 = 1$ bar, $T_1 = 300$ K et $\gamma = 1.4$.

Après le processus de réduction, le schéma est composé de 21 espèces transportées, de 11 espèces Quasi-Steady State (QSS) et de 219 réactions. L'erreur relative maximale sur la vitesse de flamme laminaire est de -26 % par rapport au schéma de référence et est atteinte à $\Phi = 1$, $P = 10$ bar et $T = 579$ K. L'erreur relative moyenne est de -15 % sur la plage de validité théorique.

VITESSE DE FLAMME, ÉPAISSEUR DE FLAMME ET TEMPÉRATURE ADIABATIQUE DE FIN DE COMBUSTION Sur sa plage de validité théorique, le schéma « SPK_21_219_11 » est en bonne adéquation avec le schéma « SPK » à partir duquel il a été dérivé en ce qui concerne les vitesses de flamme laminaire, les épaisseurs de flamme thermiques et les températures adiabatiques de fin de combustion issues de simulation de flamme 1D CANTERA [70] (cf. FIG. 5.1, FIG. 5.2 et FIG. 5.3). Lorsque la pression et la température augmente selon une compression isentropique, les grandeurs d'intérêt s'écartent du schéma « SPK » notamment à $\phi = 1$ ce qui rend son utilisation compromise pour des pressions de plus de 10 bar. Par rapport au schéma de référence, les erreurs s'accumulent. TAB. 5.2 présente les erreurs relatives moyennes et maximales sur vitesses de flamme, les épaisseurs de flamme et les températures adiabatiques de fin de combustion pour les 3 richesses étudiées. Les erreurs tendent à s'amoinrir en mélange pauvre, bien que toujours relativement élevées. Les résultats restent perfectibles et pourraient être améliorés en dérivant le schéma ARC à partir d'un schéma plus complexe que le schéma « SPK ».

DÉLAIS D'AUTO-INFLAMMATION L'erreur entre le schéma ARC « SPK_21_219_11 » et le schéma « SPK » à partir duquel il a été dérivé va dans le bon sens en diminuant l'erreur entre le schéma ARC « SPK_21_219_11 » et le schéma de référence de Jerzembeck [91] (cf. FIG. 5.5). Ainsi, les délais d'auto-inflammations sont proches des délais prédits par le schéma de référence, malgré quelques légères sur-

estimations. L'erreur relative moyenne est de 0.274. L'erreur relative sur le délais d'auto-inflammation étant définie comme :

$$\text{error } \tau_{AI} = (\tau_{AI} - \tau_{AI}^{ref}) / \tau_{AI}^{ref} \quad (5.4)$$

DÉLAIS D'INFLAMMATION À LA SUITE D'UN MÉLANGE DE GAZ FRAIS ET DE GAZ BRÛLÉS Les délais d'inflammations suite à un mélange de gaz frais et de gaz brûlés (cf. [FIG. 5.6](#)) sont légèrement supérieurs à ceux prédits par le schéma de référence. Ils sont malgré tout dans l'ordre de grandeur et respectent la tendance. L'erreur relative moyenne est de 0.688. L'erreur relative sur le délais d'inflammation étant définie comme :

$$\text{error } \tau_I = (\tau_I - \tau_I^{ref}) / \tau_I^{ref} \quad (5.5)$$

SYNTHÈSE Le schéma « SPK_21_219_11 » reproduit les quantités d'intérêt (S_L^0 , δ_L^0 , T_b , τ_{AI} et τ_I) avec une erreur relative au schéma de référence qui peut parfois être élevée notamment en ce qui concerne les vitesses et les épaisseurs thermiques de flamme laminaire à $\Phi = 1$ et à des pressions comprises entre 5 et 10 bar. La dérivation d'un schéma [ARC](#) sur la plage de fonctionnement considérée reste donc perfectible. Une des perspective principale est la dérivation d'un tel schéma à partir d'un schéma plus complet que le schéma « SPK » et initialement plus proche du schéma de référence de Jerzembeck [[91](#)].

Néanmoins, pour de faibles pressions, le schéma « SPK_21_219_11 » reste peu éloigné du schéma de référence et peut être considéré comme valide pour les calculs [LES](#) de combustion en volume constant, si la pression n'atteint pas des valeurs déraisonnables.

PROPAGATION D'UN FRONT DE FLAMME À TRAVERS UN CONDUIT

Ce chapitre décrit les travaux réalisés pour définir les limites d'extinction liées au passage d'une flamme dans un conduit isotherme. L'objectif de cette étude est de déterminer une limite de taille à partir de laquelle la simple propagation d'une flamme dans un conduit est impossible. Un nombre sans dimension peut être utilisé afin d'évaluer le rapport entre la taille du conduit et l'épaisseur de flamme : le nombre de Peclet défini par [EQ. 6.1](#) ou [EQ. 6.4](#).

La vitesse de déplacement d'un front de flamme à travers un tube peut être influencée par le diamètre de ce dernier [148]. En effet, si le diamètre est petit, la conduction de la chaleur aux parois peut affaiblir la flamme et ainsi réduire sa vitesse. Avec un diamètre suffisamment petit, la flamme peut être éteinte après quelques centimètres voire ne pas se propager du tout dans le tube. La conductivité thermique du matériau est également un paramètre important influant sur la propagation de la flamme. Ce phénomène d'extinction a été utilisé afin de construire des lampes sans risque de propagation de flamme pour l'exploration de mines de charbon. Payman *et al.* [136] présente des travaux qui permettent de connaître la distance parcourue par une flamme de méthane dans des tubes de verre et de cuivre avant d'être éteinte en fonction du diamètre du tube. Expérimentalement, pour des nombres de Peclet de l'ordre de 6 à 8, la flamme parcourt moins de 5 mm dans un tube en cuivre avant d'être éteinte.

6.1 CONFIGURATION DU CALCUL

GÉOMÉTRIE ET MAILLAGE La géométrie bidimensionnelle du calcul est très simple : elle est composée d'une seule « fente » de hauteur d et de longueur $100d$. [FIG. 6.1](#) présente la géométrie et les conditions limites utilisées, ainsi qu'une illustration d'une propagation de flamme à la suite d'un allumage préalable. Le domaine est maintenu à pression constante par une condition limite de type *outlet* avec formulation Navier Stokes Characteristic Boundary Condition (NSCBC) « OUTLET_RELAX_P_3D ». Les murs du tube sont des murs non glissant avec pertes thermiques « WALL_NOSLIP_LOSS » afin de maintenir la température des murs à température constante et égale à la température initiale des gaz frais tout au long du calcul. La température initiale varie avec la pression initiale selon une compression isentropique à partir de 1 bar 300 K avec $\gamma = 1.4$ et ce afin de s'approcher des conditions de pression et de température rencontrées en fin compression dans un moteur à pistons.

Le maillage est composé de quadrilatères et est généré de sorte à ce que le rapport entre l'épaisseur de flamme laminaire et la taille caractéristique d'une maille soit supérieur à 8 de sorte à pouvoir résoudre la flamme directement. Le nombre de points minimum dans la hauteur du tube est fixé à 31.

CHIMIE UTILISÉE La chimie utilisée est le schéma « 2S_BE2 » dont la présentation et la comparaison avec la chimie complexe est réalisée [CHAPITRE 5](#).

SETUP NUMÉRIQUE Le schéma de Lax-Wendroff [109] est utilisé pour la résolution des phénomènes convectifs et le schéma FE_2DELTA pour la résolution des phénomènes diffusifs. Le nombre de Courant Friedrichs Lewy (CFL) est fixé à 0.7 et le nombre de Fourier à 0.1. L'utilisation d'un modèle de sous maille n'est pas nécessaire étant donné la résolution très fine du maillage utilisé.

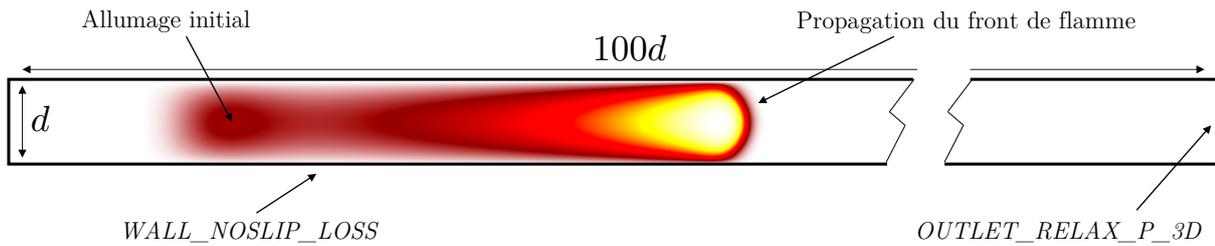


FIGURE 6.1 – Géométrie et conditions limites pour l'évaluation de la propagation d'une flamme dans une fente. Illustration par la température d'une propagation de flamme à la suite d'un allumage préalable.

1 bar 300 K				10 bar 579 K				20 bar 706 K			
Φ [-]	d [mm]	Pe_1 [-]		Φ [-]	d [mm]	Pe_1 [-]		Φ [-]	d [mm]	Pe_1 [-]	
1	3	7.67	✓	1	0.3	6.12	✓	1	0.2	7.69	✓
1	2.75	7.03	✓	1	0.275	5.61	✓	1	0.15	5.77	✓
1	2.5	6.39	✓	1	0.25	5.10	✓	1	0.125	4.81	✓
1	2.25	5.75	✗	1	0.225	4.59	✗	1	0.1	3.85	✗
1	2	5.11	✗	1	0.2	4.08	✗	1	0.075	2.88	✗

TABLE 6.1 – Matrice des cas étudiés pour évaluer le *quenching* d'une flamme d'isooctane dans une fente. ✓ : la flamme se propage; ✗ : la flamme ne parvient pas à se propager.

6.2 PRÉSENTATION DES RÉSULTATS

Afin d'évaluer la possibilité qu'une flamme se propage, une sphère de gaz brûlés est déposée au sein des gaz frais de sorte à allumer le mélange homogène. La propagation vers le côté fermé du tube est rendue impossible par l'imposition d'un taux de réaction nul dans la partie du tube à gauche de l'allumage. Cette zone tampon permet l'expansion des gaz brûlés et limite ainsi la montée en pression de ces derniers, ce qui favoriserait par la suite la propagation du front de flamme et introduirait un biais dans les résultats. Une fois la sphère de gaz brûlés déposée, 3 phénomènes peuvent être observés.

- **Cas 1** : la combustion est initiée et un front de flamme se propage.
- **Cas 2** : la combustion est initiée et un front de flamme se propage sur une courte distance avant d'être éteint.
- **Cas 3** : les pertes thermiques sont telles que la combustion ne peut pas être initiée.

FIG. 6.3 propose une visualisation des cas 1 ($d = 0.275$ mm) et 2 ($d = 0.225$ mm) à une pression et température initiales de 1 bar et 300 K à $\Phi = 1$. Des vidéos de ces calculs sont disponibles pour ces deux cas : [do.275mm](https://www.youtube.com/watch?v=pjbPP8q11ys)¹ et [do.225mm](https://www.youtube.com/watch?v=g3mD8L9CESQ)². FIG. 6.2 présente les résultats des calculs effectués sous forme de diagramme, les cas 2 et 3 résultant en un *quenching* de la flamme. TAB. 6.1 présente l'ensemble des simulations effectuées.

NOMBRES ADIMENSIONNELS Il est utile de normaliser la taille de la fente par l'épaisseur de flamme, celle-ci variant d'un très grand facteur entre les différentes conditions initiales. Cela permet de comparer chaque cas en terme de rapport entre la hauteur du conduit et l'épaisseur de la flamme et d'effectuer des conclusions universelles. Si l'épaisseur de flamme est l'épaisseur de flamme thermique :

$$Pe_1 = \frac{d}{\delta_L^0}, \quad (6.1)$$

1. <https://www.youtube.com/watch?v=pjbPP8q11ys>

2. <https://www.youtube.com/watch?v=g3mD8L9CESQ>

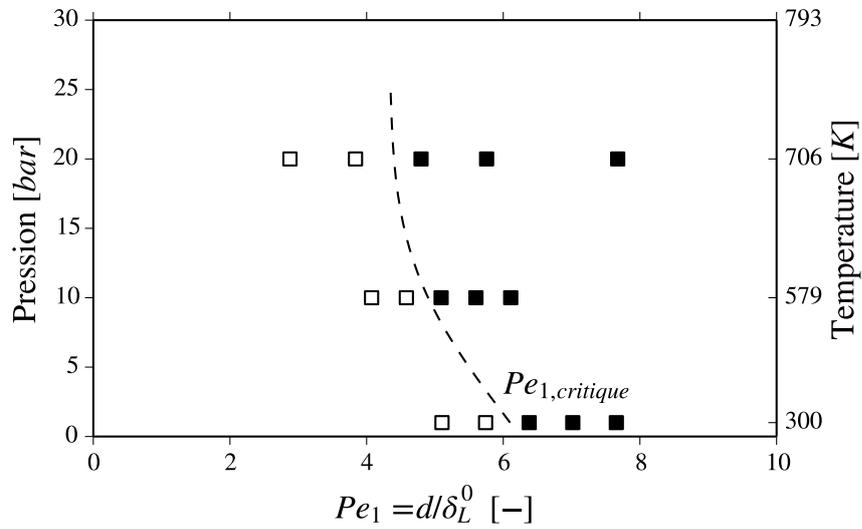


FIGURE 6.2 – Résultats des simulations pour évaluer le *quenching* de la flamme dans une fente. \square : $\Phi = 1$. Symbole plein : propagation possible; symbole vide : extinction.

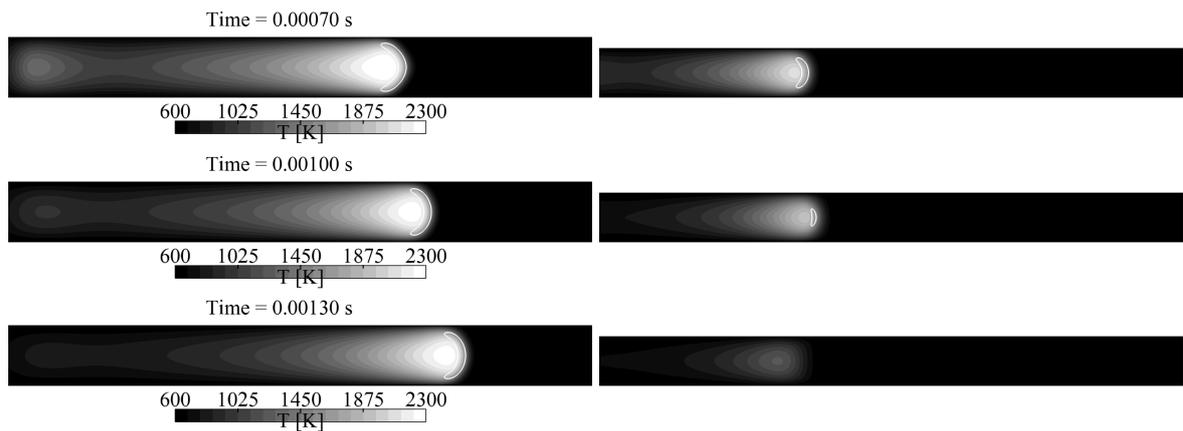


FIGURE 6.3 – Visualisation de la température et d'un iso contour à $HR = 10^{11} \text{ W m}^{-3}$ pour 2 tailles de fente et 3 instants différents. Cas d'une propagation (gauche) et cas d'une extinction (droite). Condition initiale : $P = 10 \text{ bar}$, $K = 579 \text{ K}$ et $\Phi = 1$. Gauche : $d = 0.275 \text{ mm}$; droite : $d = 0.225 \text{ mm}$.

avec d la taille du conduit et δ_L^0 l'épaisseur thermique d'une flamme laminaire définie comme

$$\delta_L^0 = \frac{T_b - T_u}{\max(|\overrightarrow{\text{grad}}(T)|)}. \quad (6.2)$$

Certains auteurs utilisent aussi une épaisseur de flamme basée sur un coefficient de diffusion et sur la vitesse de flamme laminaire :

$$\delta = \frac{D_{th}}{S_L^0}. \quad (6.3)$$

Ainsi, un deuxième nombre de Peclet peut être défini :

$$Pe_2 = \frac{d}{\delta}. \quad (6.4)$$

δ est en général plus petit que δ_L^0 [148]. Ainsi, Pe_2 est plus grand que Pe_1 .

ANALYSE À LA STœCHIO MÉTRIE A une pression et température initiales de 1 bar et 300 K, la flamme ne se propage pas lorsque Pe_1 est environ inférieur à 6 ; à 10 bar et 579 K, lorsque Pe_1 est environ inférieur à 5 ; à 20 bar et 706 K, lorsque Pe_1 est environ inférieur à 4. La flamme ne supporte alors pas le même rapport entre la taille du conduit et l'épaisseur de flamme lorsque les conditions de pression et de température changent. Plus les conditions de pression et de température augmentent, plus il est possible de réduire la taille de la fente en comparaison avec l'épaisseur de flamme tout en ayant une propagation du front de flamme. Cela peut s'expliquer par la condition limite isotherme aux parois fixée à $T = T_{init}$ ³ : la température des parois étant plus élevée, la flamme semble être moins impactée par la condition isotherme. La vitesse de consommation plus élevée (cf. FIG. 5.1) peut également favoriser la propagation : elle est le témoin d'un plus fort taux de réaction ce qui semble rendre la flamme plus robuste.

6.3 SYNTHÈSE

Le Pe_1 d'extinction pour une flamme d'iso-octane dans une fente isotherme à la stœchiométrie semble être d'environ $Pe_1 \sim 5$ (et d'environ $Pe_2 \sim 40$) pour les 3 conditions de pression et de température étudiées. Ce résultat est consistant avec les données proposées par [148] où la valeur communément admise pour Pe_2 est de l'ordre de 50 dans des tubes (et non des fentes comme il est ici étudié).

Ces résultats permettent d'établir des limites en terme de taille d'orifice à partir desquelles une simple propagation de front de flamme ne pourra plus avoir lieu. Ils établissent alors des limites pour l'allumage par le mécanisme (iv) « *Flame front torch ignition* » proposé par Yamaguchi *et al.* (voir TAB. 2.2) où la chambre principale est allumée par propagation du front de flamme.

3. Pour se rapprocher de la physique d'un MCI, il conviendrait de définir une géométrie de conduit et de résoudre la conduction solide jusqu'à un liquide de refroidissement entourant le conduit...

ÉTUDE DE L'ALLUMAGE D'UNE CHAMBRE À PRESSION CONSTANTE

Les mécanismes d'allumage de la chambre principale peuvent être différents d'une propagation de flamme classique à travers un orifice. En effet, la combustion amont en volume semi confiné entraîne une surpression dans la préchambre et ainsi un gradient de pression favorable à l'éjection des gaz à travers le conduit liant la préchambre à la chambre principale. Même si la flamme s'éteint lors de la traversée du conduit, si les pertes thermiques ne sont pas élevées dans ce dernier, les gaz chauds peuvent réussir à allumer la chambre principale. Au contraire, si les gaz subissent des pertes thermiques trop importantes aux parois du conduit, ils peuvent échouer à l'allumage de la chambre principale. Pour allumer la chambre principale de façon efficace, les gaz doivent *a priori* être éjectés :

- à haute vitesse pour favoriser le mélange dans la chambre principale (jusqu'à une certaine limite);
- à haute vitesse pour minimiser le temps de séjour dans l'orifice et ainsi minimiser les pertes thermiques;
- avec un taux de réaction élevé;
- à haute température.

Certains objectifs ne peuvent pas être atteints simultanément. Diminuer la taille de l'orifice induit un plus fort gradient de pression entre les deux chambres et ainsi une plus forte vitesse d'éjection. Mais la taille réduite de l'orifice contribue au *quenching* de la flamme : les taux de réaction sont alors fortement réduits et la température l'est également. Des compromis doivent donc être réalisés afin d'optimiser le système. Par ailleurs, les hautes vitesses d'éjections génèrent de la turbulence qui plissent la flamme par la suite et peuvent affaiblir cette dernière. Ces hautes vitesses peuvent également être trop importantes et mélanger trop rapidement les gaz chauds avec le mélange frais, diminuant ainsi la température de façon trop significative par effet de mélange. Il semble donc y avoir une limite en ce qui concerne la vitesse d'éjection des gaz.

Le système étudié est composé d'une préchambre, d'une chambre principale maintenue à pression constante et d'un conduit liant la préchambre à la chambre principale. La combustion est initiée dans la préchambre de volume constant. L'objectif de ce chapitre est d'évaluer l'effet de la taille du conduit sur la capacité de la flamme débouchant à allumer la chambre principale. A noter que les phénomènes d'auto inflammation par accumulation de gaz chaud et de radicaux actifs présentés [SECTION 2.2.3](#) ne sont pas visibles sur ce type de simulation. En effet, une condition limite de type *outlet* est utilisée pour maintenir la chambre principale à pression constante ce qui implique l'évacuation des gaz de la chambre principale.

7.1 ENCEINTE INITIALEMENT AU REPOS

7.1.1 CONFIGURATION DU CALCUL

GÉOMÉTRIE ET MAILLAGE La géométrie est un cas académique bidimensionnel composé d'une pré-chambre de côté 1 cm, d'un conduit de hauteur d variable et de longueur 5 mm et d'une chambre principale maintenue à pression constante par une condition limite de type *outlet* avec formulation `NCSBC « OUTLET_RELAX_P_3D »`. Les murs de la préchambre, du tube et de la chambre principale sont des murs non glissant avec pertes thermiques « `WALL_NOSLIP_LOSS` » afin de maintenir la température des murs à température constante et égale à la température initiale des gaz frais tout au long du calcul. La température initiale évolue avec la pression initiale selon une compression isentropique

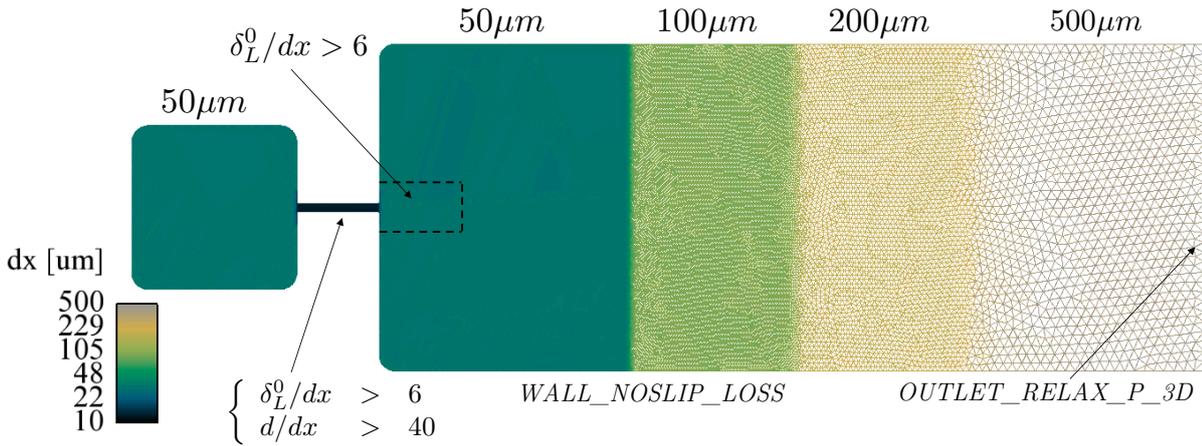


FIGURE 7.1 – Géométrie, conditions limites et maillage pour l'évaluation de l'effet de la taille du conduit sur la capacité à allumer la chambre principale à pression constante.

depuis 1 bar 300 K avec $\gamma = 1.4$ et ce afin de s'approcher des conditions de pression et de température rencontrées en fin compression dans un moteur à pistons.

Le maillage est composé de triangles et est généré de sorte à ce que le rapport entre l'épaisseur de flamme laminaire et la taille caractéristique d'une maille soit supérieur à 6 dans le tube de sorte à ce que le modèle Thickened Flame model for Large Eddy Simulation (TFLES) dynamique ne soit pas activé dans le conduit. Le nombre de points minimum dans la hauteur du tube est fixé à 40. FIG. 7.1 présente une visualisation de la géométrie, des conditions limites et du maillage.

CHIMIE UTILISÉE Le schéma cinétique utilisé est le schéma « 2S_BE2 » dont la présentation et la comparaison avec la chimie complexe est réalisée CHAPITRE 5.

SETUP NUMÉRIQUE Le schéma de Lax-Wendroff [109] est utilisé pour la résolution des phénomènes convectifs et le schéma FE_2DELTA pour la résolution des phénomènes diffusifs. Le nombre de CFL est fixé à 0.7 et le nombre de Fourier à 0.1. Le modèle de sous maille de Smagorinsky dynamique [113] est utilisé pour la modélisation Sub-Grid Scale (SGS). Le modèle de combustion TFLES [32] est utilisé pour résoudre la flamme sur le maillage considéré. La flamme est épaissie seulement lorsque cela est nécessaire à l'aide de la formulation dynamique de TFLES.

7.1.2 PRÉSENTATION DES RÉSULTATS

Le domaine est initialement au repos, rempli d'un mélange d'iso-octane et d'air. L'allumage de la préchambre est réalisé au centre de la préchambre par le modèle « Energy Deposition » de Guihem Lacaze [104] présenté SECTION F.4. La combustion en volume semi confiné provoque l'augmentation de la pression dans la préchambre et ainsi vers la chambre principale à pression constante. La flamme dans la préchambre prend une forme circulaire, très rapidement déformée par la fuite au travers du conduit (voir FIG. 7.2). Par la suite, plusieurs phénomènes peuvent être aperçus :

- la flamme peut réussir à survivre à la traversée du conduit et allumer la chambre principale si les pertes thermiques ne sont pas trop importantes ;
- la flamme peut être affaiblie par les pertes thermiques aux parois du conduit, mais réussir à enflammer la chambre principale à une distance de l'orifice de sortie relativement faible ;
- la flamme est éteinte à la traversée du conduit et les pertes thermiques sont trop fortes pour que le jet enflamme la chambre principale.

1 bar 300 K				10 bar 579 K				20 bar 706 K			
Φ [-]	d [mm]	Pe_1 [-]		Φ [-]	d [mm]	Pe_1 [-]		Φ [-]	d [mm]	Pe_1 [-]	
1	1	2.55	✓	1	0.3	6.12	✓	1	0.2	7.69	✓
1	0.5	1.28	✗	1	0.2	4.08	✗	1	0.1	3.85	✓
1	0.3	0.767	✗	1	0.1	2.04	✗	1	0.07	2.69	✗

TABLE 7.1 – Matrice des cas étudiés pour évaluer la capacité d’une flamme d’isooctane débouchant dans une enceinte à pression constante à allumer le mélange frais en fonction de la taille de l’orifice. ✓ : la flamme se propage; ✗ : la flamme ne parvient pas à se propager.

FIG. 7.2 présente une visualisation d’une réussite d’allumage ($d = 1$ mm) et d’un échec ($d = 0.5$ mm) à 1 bar 300 K $\Phi = 1$. Les vidéos de ces calculs sont disponibles pour ces deux cas : [d1.0mm](#)¹ et [do.5mm](#)². TAB. 7.1 présente l’ensemble des simulations effectuées.

ANALYSE À LA STœCHIMÉTRIE Les limites en taille du conduit pour l’allumage de la chambre principale sont différentes des limites en taille du conduit pour la propagation d’un front de flamme étudiées CHAPITRE 6. A 1 bar 300 K $\Phi = 1$, la limite de propagation de front de flamme dans une fente est de $Pe_1 \sim 6$ alors que le jet issu de la préchambre avec $Pe_1 \sim 2$ réussit à allumer la chambre principale. Cette observation est la démonstration que la propagation de flamme n’est pas le seul mécanisme rentrant en jeu dans l’allumage de la chambre principale par le jet issu de la préchambre. Si le jet est suffisamment chaud, il peut réussir à créer une flamme dans la chambre principale composée d’un noyau de gaz brûlés et d’un contour réactif issu de la réaction chimique des gaz frais avec les gaz chaud. La limite en Peclet critique est ainsi moins élevée que pour une propagation de flamme classique. Pour notre système, c’est une bonne nouvelle puisqu’on recherche *a priori*³ l’allumage et non l’extinction. Pour les applications de sécurité industrielle, cela veut dire qu’il est impératif de considérer le système dans son ensemble et que la limite de propagation de flamme dans un conduit ne garantit pas la sécurité dans le cas d’une montée en pression en amont.

Néanmoins, la différence entre $Pe_{1,critique}^{Pcte}$ et $Pe_{1,critique}^{fente}$ tend à s’étroffer avec la montée en pression pour ce volume de préchambre. Ce phénomène peut s’expliquer par les vitesses d’éjections mises en jeu bien plus importantes lorsque la taille du conduit devient très faible. En effet, à 20 bar 706 K $\Phi = 1$ et une hauteur $d = 70$ μ m, la pression dans la préchambre atteint jusqu’à 2.25 fois la pression initiale et induit des vitesses d’éjections de l’ordre de 600 à 700 m s^{-1} . Le jet est donc éjecté à des vitesses colossales et le mélange avec les gaz frais ne peut être que très intense, ce qui semble provoquer un refroidissement trop important des gaz éjectés pour initier la combustion.

FIG. 7.4 présente l’évolution temporelle du débit massique, du débit d’enthalpie et de la vitesse moyenne en sortie de l’orifice ainsi que du taux de dégagement de chaleur moyen dans la chambre principale pour les conditions initiales 1 bar 300 K $\Phi = 1$ et pour 3 hauteurs de conduit différentes. A l’aide du taux de dégagement de chaleur moyen dans la chambre principale, il est possible de discriminer les cas où le jet débouchant échoue à l’allumage. Le débit d’enthalpie en sortie de l’orifice semble être un élément favorable à l’allumage puisqu’il est le plus élevé lorsque l’allumage est un succès ($d = 1$ mm). Le temps de résidence dans le conduit ne semble pas jouer au premier ordre puisque malgré les vitesses d’éjections plus fortes obtenues avec de petites hauteurs de conduit, les gaz éjectés produisent un débit d’enthalpie moindre et échouent à l’allumage de la chambre principale. Les pertes thermiques à petite hauteur de conduit semblent être plus élevées ce qui justifie la tendance du débit d’enthalpie avec la hauteur du conduit d .

1. <https://www.youtube.com/watch?v=SfUMNAJpkTQ>

2. <https://www.youtube.com/watch?v=cRbH4xlxCV4>

3. Par la suite, plusieurs régimes d’allumage sont exposés et l’extinction n’est pas toujours un phénomène à éviter...

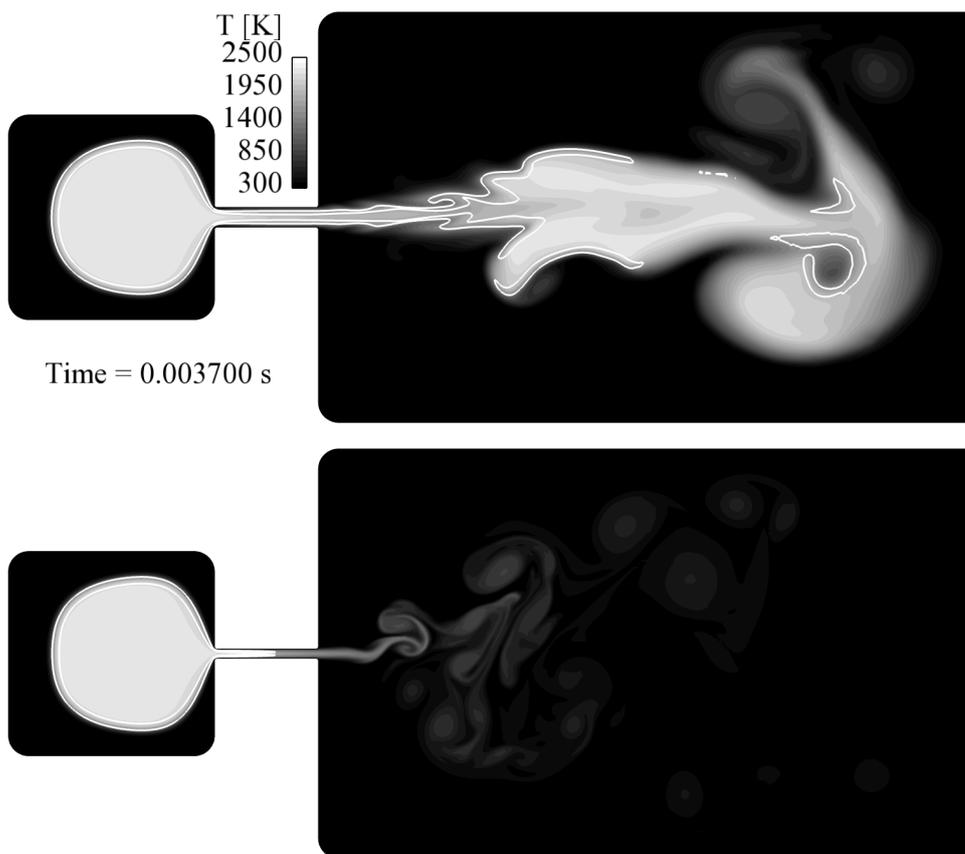


FIGURE 7.2 – Visualisation de la température et d'un iso contour à $HR = 10^8 \text{ W m}^{-3}$ pour 2 tailles de conduit différentes et un instant donné. Cas d'une propagation (haut) et d'une extinction (bas). Condition initiale : $P = 1 \text{ bar}$, $K = 300 \text{ K}$ et $\Phi = 1$. Haut : $d = 1 \text{ mm}$; bas : $d = 0.5 \text{ mm}$.

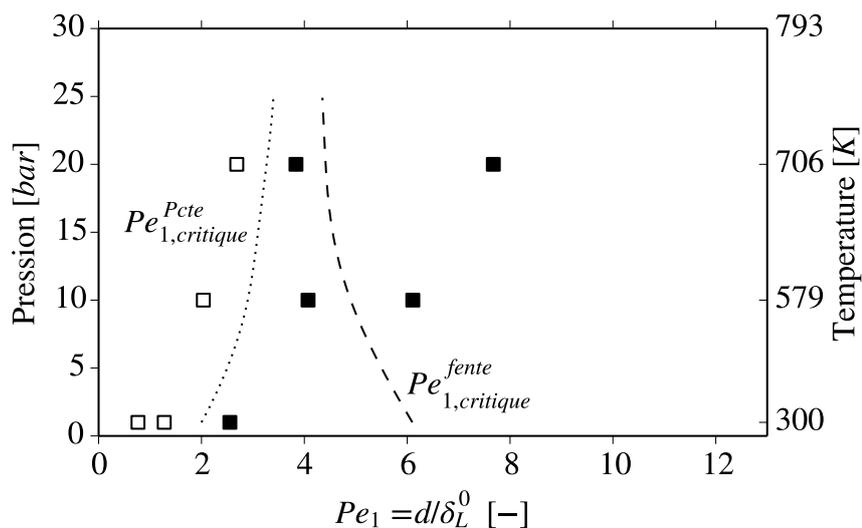


FIGURE 7.3 – Résultats des simulations pour évaluer la capacité d'une flamme à se propager dans une enceinte à pression constante depuis une préchambre. $\Phi = 1$. Symbole plein : réussite de l'allumage de la préchambre; symbole vide : échec de l'allumage de la préchambre.

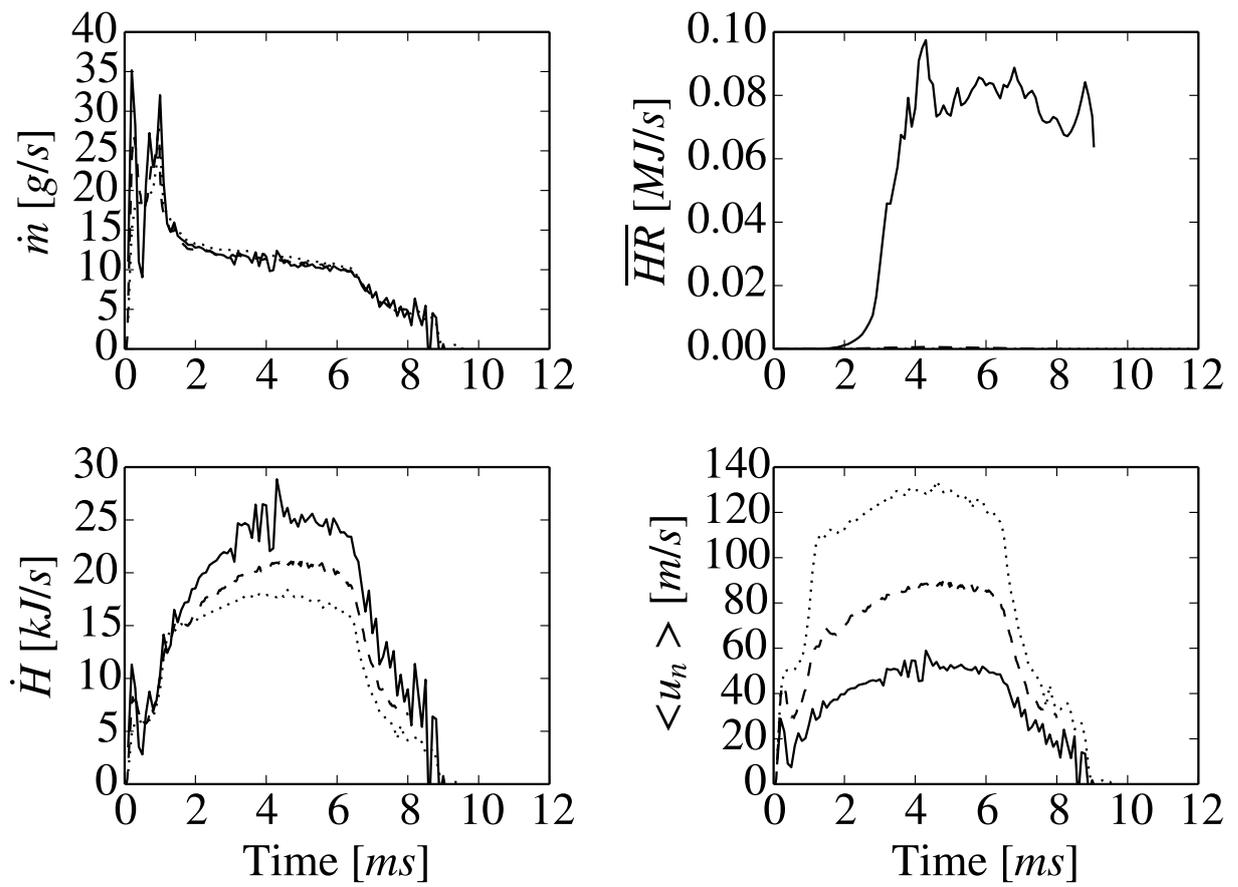


FIGURE 7.4 – Évolution du débit massique, du débit d'enthalpie et de la vitesse moyenne au travers de l'orifice et du taux de réaction moyen dans la chambre principale. — : $d = 1$ mm ; - - - : $d = 0.5$ mm ; : $d = 0.3$ mm.

7.1.3 SYNTHÈSE

Cette étude à chambre principale à pression constante et au repos permet d'obtenir des nombres de Peclet critiques dictant les limites d'allumage de l'enceinte dans cette configuration académique. Cependant, les résultats peuvent ne pas être universels et être influencés, par exemple, par le volume de la préchambre ou la position de l'allumage. Une étude supplémentaire avec plusieurs volumes de préchambre semble nécessaire. Néanmoins, les limites établies peuvent être utilisées afin d'établir, pour ce volume de préchambre, des ordres de grandeur pour la limite de l'allumage par le mécanisme **(iii)** « *flame kernel torch ignition* » proposé par Yamaguch *et al.* (voir [TAB. 2.2](#)) où la flamme n'est pas éteinte à la traversée du conduit. L'étude des mécanismes **(ii)** « *composite ignition* » ou **(i)** « *well dispersed burning* » nécessite une chambre à volume constant afin de pouvoir simuler l'accumulation des radicaux actifs et des gaz chauds dans la chambre principale. C'est l'objet du [CHAPITRE 8](#).

 ÉTUDE DE L'ALLUMAGE D'UNE CHAMBRE À VOLUME CONSTANT

Lorsque la chambre principale est un volume fermée, les gaz chauds provenant de la préchambre s'accumulent et peuvent provoquer divers mécanismes de réaction. Les gaz chauds peuvent provoquer la réaction directe du mélange frais autour d'eux. Ils peuvent également, plus tardivement, activer des mécanismes d'auto inflammation des gaz frais. Un travail préliminaire sur ces questions est réalisé par Yamaguchi *et al.* [190] qui classe les allumages en 4 mécanismes différents (voir SECTION 2.2.3). Ces mécanismes sont décrits TAB. 2.2.

L'objectif de cette partie est l'étude des mécanismes (i) à (iv) mis en évidence par Yamaguchi *et al.* [190] en 1985 à l'aide de cas simplifiés à volume constant. Selon Yamaguchi *et al.* [190] le cas (ii) serait le plus efficace. Attention néanmoins, l'étude quantitative des cas (i) voire (ii) nécessite l'utilisation d'un schéma de cinétique chimique bien plus complexe qu'un schéma de type GRC (voir ANNEXE G).

8.1 DÉFINITIONS PRÉLIMINAIRES

Plusieurs grandeurs caractéristiques sont définies afin de faciliter l'analyse des cas étudiés :

- T_{01} : temps pour lequel 1 % de la masse totale dans la chambre principale est brûlée, il est associé au moment où les gaz de la préchambre pénètrent dans la chambre principale.
- T_{10} : temps pour lequel 10 % de la masse totale dans la chambre principale est brûlée, il est associé au début de la combustion de la charge principale.
- T_{90} : temps pour lequel 90 % de la masse totale dans la chambre principale est brûlée, il est associé à la fin de la combustion de la charge principale.
- $\tau_b = T_{90} - T_{10}$: caractérise le temps de combustion de la charge principale.
- $\tau_i = T_{10} - T_{01}$: caractérise le temps d'allumage de la charge principale à partir du moment où les gaz de la préchambre ont pénétré dans la chambre principale.

8.2 ÉTUDE DES RÉGIMES DE COMBUSTION

8.2.1 ÉTUDE AVEC CHIMIE GRC

8.2.1.1 CONFIGURATION DU CALCUL

GÉOMÉTRIE ET MAILLAGE La géométrie est inspirée des travaux de Yamaguchi *et al.* [190]. L'étude numérique se porte sur un cas académique bidimensionnel composé d'une préchambre de rayon 0.5 cm, d'un conduit de hauteur d variable et de longueur 5 mm et d'une chambre principale dont le volume varie en fonction du rapport de volume r_v considéré. Les murs de la préchambre, du tube et de la chambre principale sont des murs non glissants avec pertes thermiques afin de maintenir la température des murs à température constante et égale à la température initiale des gaz frais tout au long du calcul.

Le maillage est composé de triangles et est généré de sorte à ce que le rapport entre l'épaisseur de flamme laminaire et la taille caractéristique d'une maille soit supérieur à 6 dans le conduit. Le nombre de points minimum dans la hauteur du tube est fixé à 30. FIG. 8.1 présente une visualisation de la géométrie, du maillage et des conditions limites.

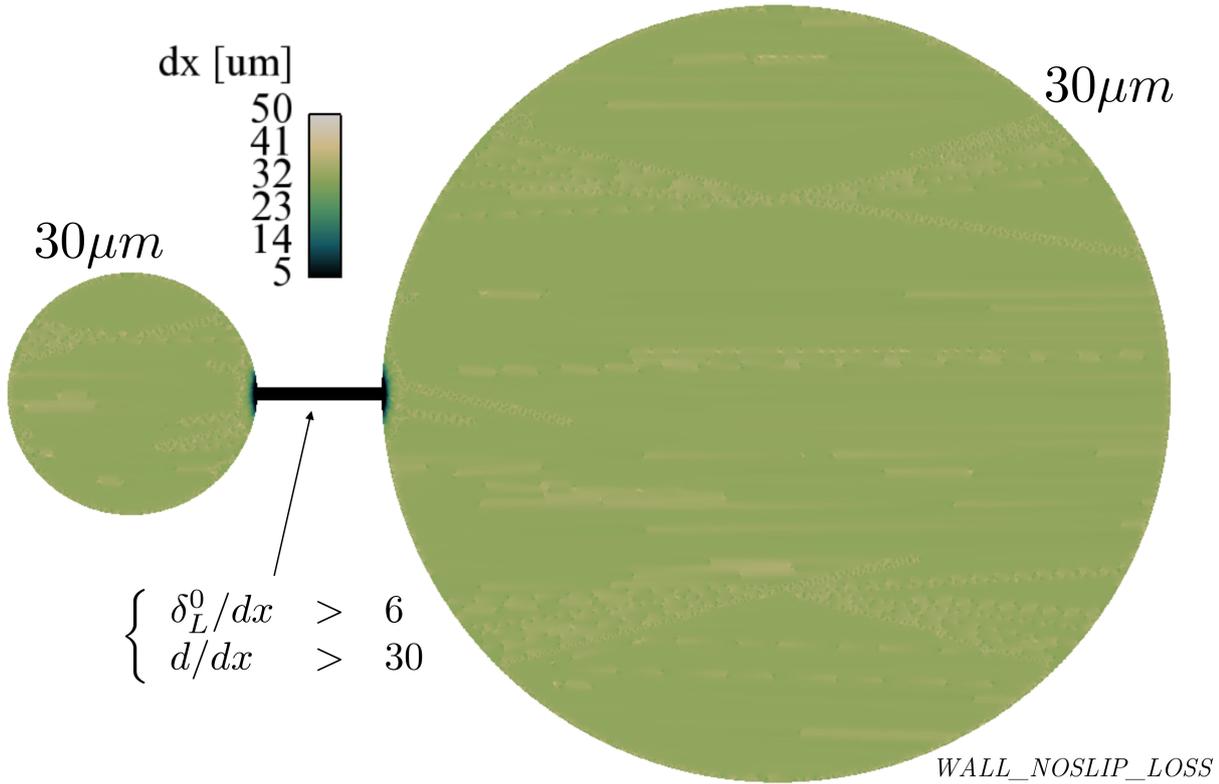


FIGURE 8.1 – Géométrie, conditions limites et maillage pour le cas académique de Yamaguchi.

CHIMIE UTILISÉE Le schéma cinétique utilisé est le schéma « 2S_BE2 » dont la présentation et la comparaison avec la chimie complexe est réalisée [CHAPITRE 5](#). Ce schéma ne permet pas de simuler avec précision les cas (i) « *well dispersed burning* » voire (ii) « *Composite ignition* » en raison de sa construction et de sa simplicité (voir [SECTION G.3](#)).

SETUP NUMÉRIQUE Le schéma de Lax-Wendroff [109] est utilisé pour la résolution des phénomènes convectifs et le schéma FE_2DELTA pour la résolution des phénomènes diffusifs. Le nombre de CFL est fixé à 0.7 et le nombre de Fourier à 0.1. Le modèle de sous maille de Smagorinsky dynamique est utilisé pour la modélisation SGS. Le modèle de combustion TFLES est utilisé pour résoudre la flamme sur le maillage considéré. La flamme est épaissie seulement lorsque cela est nécessaire¹ à l'aide de la formulation dynamique de TFLES.

8.2.1.2 PRÉSENTATION DES RÉSULTATS

Le domaine est initialement au repos, rempli d'un mélange d'iso-octane et d'air. L'allumage de la préchambre est réalisé au centre de la préchambre par le modèle « *Energy Deposition* » de *Guilhem Lacaze* [104] présenté [SECTION F.4](#). La combustion en volume semi confiné provoque l'augmentation de la pression dans la préchambre et ainsi un débit vers la chambre principale tant que l'équilibre de pression n'est pas atteint. La flamme dans la préchambre prend une forme circulaire, déformée par la fuite au travers du conduit. Par la suite, plusieurs phénomènes peuvent être aperçus, en fonction de la taille du conduit :

- la flamme peut réussir à survivre à la traversée du conduit et allumer la chambre principale si les pertes thermiques ne sont pas trop importantes (voir [FIG. 8.3](#) $d = 2$ mm);

1. A basse pression, le maillage est suffisamment fin pour résoudre la flamme sans épaississement. Lorsque le domaine monte en pression, il peut y avoir besoin d'épaissir la flamme pour la résoudre.

1 bar 300 K

Φ [-]	d [mm]	Pe_1 [-]	V_{pc} [mm ²]	rv [-]	Description
1	2	5.11	78.5	0.1	(iii) « <i>flame kernel torch ignition</i> »
1	1	2.56	78.5	0.1	(iii) « <i>flame kernel torch ignition</i> »
1	0.75	1.92	78.5	0.1	(ii) « <i>composite ignition</i> »
1	0.5	1.28	78.5	0.1	✗ : échec de l'allumage de la préchambre

TABLE 8.1 – Matrice des cas étudiés pour évaluer la capacité d'une flamme d'isooctane débouchant dans une enceinte de volume constant à allumer le mélange frais en fonction de la taille de l'orifice et du rapport de volume $rv = V_{pc}/V_c$.

- la flamme peut être affaiblie par les pertes thermiques aux parois du conduit, mais réussir à enflammer la chambre principale à une distance de l'orifice de sortie relativement faible (voir FIG. 8.3 $d = 1$ mm);
- la flamme est éteinte à la traversée du conduit, mais l'accumulation de gaz chaud dans la chambre de volume constant provoque une combustion tardive (voir FIG. 8.3 $d = 0.75$ mm);
- la flamme est éteinte à la traversée du conduit et les pertes thermiques sont trop fortes pour que le jet permette l'allumage de la chambre de volume constant.

Ces cas sont résumés par TAB. 8.1.

ANALYSE DU CAS $rv = 0.1$, $P_{init} = 1$ bar, $T_{init} = 300$ K ET $\Phi = 1$ La combustion dans la géométrie d'un rapport de volume $rv = V_{pc}/V_c = 0.1$ (où V_{pc} est le volume de la préchambre et V_c est le volume de la chambre principale) et à des conditions initiales de 1 bar et 300 K fait apparaître de nombreux mécanismes fondamentaux pour l'étude. FIG. 8.3 présente plusieurs visualisations des calculs numériques à différents instants clés et ce pour 3 hauteurs différentes. FIG. 8.2 présente l'évolution de la pression moyenne, du taux de dégagement de chaleur moyen et de la fraction massique de gaz brûlés moyenne dans la chambre principale ainsi que du débit massique, du débit d'enthalpie et de la vitesse moyenne en sortie de l'orifice. Les vidéos de ces calculs sont disponibles pour trois cas : **d2.0mm**², **d1.0mm**³ et **do.75mm**⁴.

- $d = 2$ mm, $Pe_{1,critique}^{Pcte} < Pe_1 = 5.11 < Pe_{1,critique}^{fente}$. De très fortes oscillations acoustiques sont présentes sur ce cas suite à l'allumage par dépôt d'énergie. L'allumage se déroule selon un régime proche du régime (iii) « *flame kernel torch ignition* » (voir TAB. 2.2) où une flamme turbulente est créée dans la chambre principale, consommant la charge carburée. La combustion ne peut résulter d'une propagation de front de flamme classique puisque $Pe_1 = 5.11 < Pe_{1,critique}^{fente}$. Lorsque la pression dans la chambre principale \bar{P}^c devient supérieure à la pression dans la préchambre \bar{P}^{pc} ($t > 5.15$ ms) un écoulement inverse de gaz brûlés se produit. Le gradient de pression maximum dans la chambre principale, caractéristique de la brutalité de la combustion, est relativement faible en comparaison avec les autres cas. La charge carburée est entièrement consommée à $t \sim 10$ ms. La durée de combustion de la charge principale τ_b , définie comme le temps entre 10 % de masse brûlée et 90 % de masse brûlée, est la plus lente des cas étudiés : 5.62 ms (cf. FIG. 8.10, allumage au centre).
- $d = 1$ mm, $Pe_{1,critique}^{Pcte} < Pe_1 = 2.557 < Pe_{1,critique}^{fente}$. Les oscillations acoustiques sont moins marquées mais présentes. L'allumage se déroule toujours selon un régime (iii) « *flame kernel torch ignition* » (voir TAB. 2.2). Lorsque $\bar{P}^c > \bar{P}^{pc}$ ($t > 5.15$ ms), un écoulement inverse de gaz frais et de gaz brûlés provoque l'apparition d'une flamme dans la préchambre. La combustion est plus rapide que dans le cas $d = 2$ mm comme le montre l'évolution de la pression moyenne, de la fraction massique de gaz brûlés moyenne ainsi que du taux de dégagement de chaleur moyen dans la chambre principale. Le gradient de pression maximum est bien plus élevé par rapport

2. <https://www.youtube.com/watch?v=hHDmI-JXfs4>

3. <https://www.youtube.com/watch?v=b54WkwZrbXU>

4. <https://www.youtube.com/watch?v=Wf-ntj3J4dM>

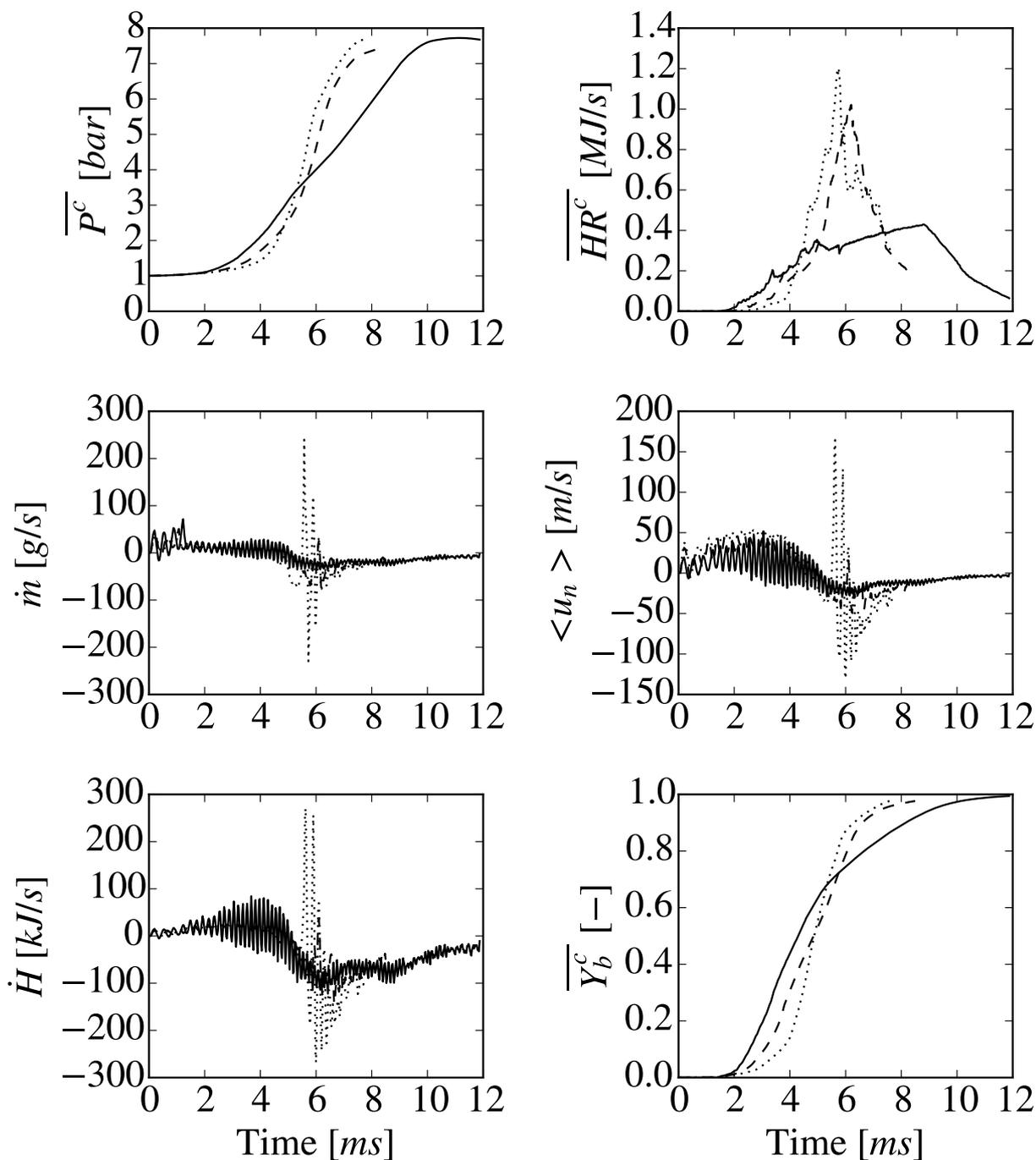


FIGURE 8.2 – Évolution de la pression moyenne, du taux de dégagement de chaleur moyen et de la fraction massique de gaz brûlés dans la chambre principale ainsi que du débit massique, du débit d’enthalpie et de la vitesse moyenne au travers de l’orifice pour 3 tailles de conduit différentes. Rapport de volume de 0.1. Cas académique de Yamaguchi *et al.* [190]. — : $d = 2$; --- : $d = 1$; : $d = 0.75$.



FIGURE 8.3 – Visualisation de la température et d'un iso contour à $HR = 10^8 \text{ W m}^{-3}$ pour 3 hauteurs et 4 instants différents. Condition initiale : $P = 1 \text{ bar}$, $K = 300 \text{ K}$ et $\Phi = 1$. De haut en bas : $d = 2 \text{ mm}$; $d = 1 \text{ mm}$; $d = 0.75 \text{ mm}$.

au cas $d = 2$ mm. La charge carburée est entièrement consommée à $t \sim 8$ ms. La durée de combustion de la charge principale τ_b est de 3.52 ms, c'est 2.1 ms de moins que dans le cas $d = 2$ mm (cf. FIG. 8.10, allumage au centre). Pour un moteur fonctionnant à 3000 tr/min, ces 2.1 ms correspondent à 36 °vilebrequin.

- $d = 0.75$ mm, $Pe_{1,critique}^{Pcte} < Pe_{1,critique}^{fente} < Pe_1 = 1.92$. Les oscillations acoustiques semblent être fortement atténuées avec cette hauteur de conduit. Les prédictions de l'étude à pression constante semblent correctes et valables pour le début de la combustion à volume constant : pour $Pe_1 = 1.92 < Pe_{1,critique}^{Pcte}$ la flamme est éteinte à la sortie de l'orifice. L'accumulation de gaz chaud dans la chambre principale provoque une combustion plus tardive du mélange au centre de cette dernière. Cette observation est cohérente avec les délais d'allumage présentés FIG. 8.9 (allumage au centre). L'allumage semble être de type (ii) « composite ignition » (voir TAB. 2.2) : l'allumage a lieu en raison de réactions chimiques et d'effets thermiques. Attention néanmoins, les schémas de cinétique chimique GRC ont tendances à mal évaluer le délai d'auto inflammation⁵ : l'analyse ne peut être que qualitative. Dans ce cas, la combustion est la plus brutale : le gradient de pression maximum est le plus fort ainsi que la valeur de $\max(\overline{HR}^c)$. La position de la combustion au centre de la chambre principale (voir l'instant à 4.5 ms) fait que lorsque $\overline{P}^c > \overline{P}^{pc}$ ($t > 4.7$ ms), un écoulement inverse de gaz frais provoque une combustion très vive dans la préchambre (des gaz frais sont injectés dans une enceinte remplie de gaz brûlés à $T > 2000$ K). Cette combustion vive fait augmenter \overline{P}^{pc} et rétablit un écoulement de la pré chambre vers la chambre principale jusqu'à ce que $\overline{P}^c > \overline{P}^{pc}$ à nouveau et que le même phénomène se reproduise. Une série d'oscillations du sens de l'écoulement dans le conduit apparait alors due à ce mécanisme en chaîne. Ces oscillations sont visibles sur le débit massique, le débit d'enthalpie et la vitesse moyenne en sortie d'orifice aux alentours de $t \sim 6$ ms. La charge carburée est consommée à $t \sim 6.6$ ms. La durée de combustion de la charge principale τ_b est de 2.60 ms, c'est 3.02 ms de moins que dans le cas $d = 2$ mm (cf. FIG. 8.10, allumage au centre). Pour un moteur fonctionnant à 3000 tr/min, ces 3.02 ms correspondent à 61 °vilebrequin.
- $d = 0.5$ mm, $Pe_{1,critique}^{Pcte} < Pe_{1,critique}^{fente} < Pe_1 = 1.28$. La flamme est totalement éteinte et la combustion n'a pas lieu dans la chambre principale. Le régime (i) « well dispersed burning » (voir TAB. 2.2) n'est pas reproduit.

Conformément aux conclusions de Yamaguchi *et al.* [190], le régime (ii) « composite ignition » semble être le plus efficace : la durée de la combustion de la charge principale est de 3.02 ms de moins que la combustion la plus lente ce qui est considérable et peut conditionner la réussite ou l'échec de l'allumage sur un cycle moteur réel. L'importance d'obtenir une combustion vive est alors mise en avant. Malgré la plus petite hauteur de conduit la charge est la plus vite consommée dans le cas $d = 0.75$ mm.

Des oscillations acoustiques sont présentes sur l'ensemble des cas étudiés. Ces oscillations sont connues des motoristes puisque dès 1982 Gupta *et al.* [79] étudient l'origine des oscillations qui apparaissent dans les moteurs à chambres divisées. Avec un allumage dans la préchambre, si la pression dans cette dernière augmente de façon significative sur un temps très court par rapport à l'échelle caractéristique acoustique de la chambre principale, le différentiel de pression résulte en une génération d'ondes de compression et de détente au niveau du conduit. Le saut de pression provoqué à l'allumage continue de se propager au cours du temps, d'un côté à l'autre de la chambre. L'amplitude des oscillations dépend de la géométrie, de la rapidité de la combustion, et de la position de l'allumage dans la préchambre [79]. Le système peut être apparenté à un résonateur de Helmholtz [148]. Ces oscillations sont indésirables : elles résultent en la production de bruits et provoquent l'usure prématurée des pièces mécaniques.

Le cas $d = 0.75$ mm fait apparaître un autre type d'oscillation qui peut être tout aussi dangereux pour la mécanique du MCI. Après $t \sim 4.7$ ms, la pression dans la chambre devient supérieure à la pression dans la préchambre ce qui provoque l'éjection de gaz frais dans la préchambre remplie de gaz brûlés à température élevée. Cela provoque une combustion vive, une montée en pression brutale de la préchambre et une éjection de gaz brûlés jusqu'à ce que $\overline{P}^c > \overline{P}^{pc}$ à nouveau et que le mécanisme se reproduise. Ce type d'instabilité peut provoquer du bruit et de l'usure mécanique prématurée : il

5. L'évaluation des délais d'auto inflammation et la simulation de ce cas avec une chimie ARC est en cours de réalisation.

semble devoir être évité. Ce phénomène est présent lorsque la combustion est éloignée de la sortie de l'orifice, ce qui provoque l'écoulement inverse de gaz frais. Malheureusement, cette combustion détachée de la sortie de l'orifice de type **(ii)** « *composite ignition* » semble être aussi la plus efficace.

8.2.1.3 SYNTHÈSE

L'étude permet de reproduire par la simulation numérique certains phénomènes déjà observés expérimentalement en 1982 [79] et en 1985 [190] sur des moteurs à chambres divisées. En effet, les oscillations acoustiques observées lors de l'allumage des MCI à chambres divisées [79] sont reproduites dans les simulations numériques effectuées. Cela souligne l'importance de l'utilisation d'un code de CFD compressible, multidimensionnel et instationnaire pour l'étude de la physique présente : ces non uniformités de pression sont fonction de la position spatiale et du temps. Par ailleurs, deux des mécanismes de Yamaguchi *et al.* [190] (**(ii)** et **(iii)**, voir TAB. 2.2) sont reproduits.

L'étude de propagation de flamme dans un conduit réalisée CHAPITRE 6 permet de distinguer le régime **(iii)** « *flame kernel torch ignition* » du régime **(iv)** « *flame front torch ignition* » à l'aide du critère $Pe_{1,critique}^{fente}$. L'étude à pression constante réalisée CHAPITRE 7 se voit être un moyen efficace de définir une limite pour le « *quenching* » de la flamme dans le conduit au cours de la première phase de la simulation où l'élévation de pression dans la chambre principale n'est pas encore trop importante. La limite en $Pe_{1,critique}^{Pcte}$ est, dans ce cas, la limite entre les régimes **(iii)** « *flame kernel torch ignition* » où la flamme n'est pas éteinte à la traversée du conduit et **(ii)** « *composite ignition* » où la flamme est éteinte. Ces informations sont très importantes puisqu'elles permettent, selon la taille du conduit, de connaître le régime d'allumage du système *a priori*.

Le caractère quantitatif des analyses portées sur le régime **(ii)** « *composite ignition* » où le délai d'auto inflammation du mélange est un paramètre important mérite d'être nuancé. En effet, la simplicité du schéma de cinétique chimique utilisé ne permet pas de garantir un délai d'auto inflammation précis. Afin de réussir à étudier de façon quantitative les régimes **(ii)** « *composite ignition* » et **(i)** « *well dispersed burning* », une chimie plus complexe doit être utilisée, tout en garantissant un coût de calcul raisonnable. La chimie analytiquement réduite (ARC, voir SECTION G.5) est pour cela adaptée. En effet, les schémas ARC sont réalisés à partir de schémas complexes et ce type de schéma de cinétique chimique contient de multiples chemins réactionnels essentiels à la description des régimes d'allumages complexes tels que ceux décrits précédemment.

8.2.2 ÉTUDE AVEC CHIMIE ARC

L'objectif est d'évaluer l'influence de la chimie utilisée sur la simulation du processus d'allumage de la chambre principale. Pour cela, les cas étudiés SECTION 8.2.1 sont ici à nouveau simulés avec la chimie ARC « SPK_21_219_11_QM » présentée SECTION 5.3. L'utilisation d'une chimie ARC augmente le coût d'un calcul par rapport à un schéma GRC du fait du nombre d'espèces transportées plus important (dans ce cas, la chimie ARC utilisée transporte 21 espèces contre 6 espèces en chimie GRC « 2S_BE2 »). De ce fait, seule la partie correspondant au processus d'allumage est simulée : les simulations numériques sont réalisées jusqu'à ce que la pression moyenne dans le domaine soit de 4 bar (ce qui correspond à une consommation d'environ 70 % de la charge totale). Cela permet d'étudier à un coût raisonnable l'ensemble des cas.

8.2.2.1 CONFIGURATION DU CALCUL

L'étude est réalisée dans la même configuration que SECTION 8.2.1, présentée SECTION 8.2.1.1. Seule la chimie change : le schéma ARC « SPK_21_219_11_QM » est utilisé. La simulation partielle des cas étudiés permet de s'affranchir du modèle de combustion TFLES. En effet, les gaz ne sont pas comprimés à plus de 4 bar ce qui permet la résolution directe de la flamme sur le maillage considéré.

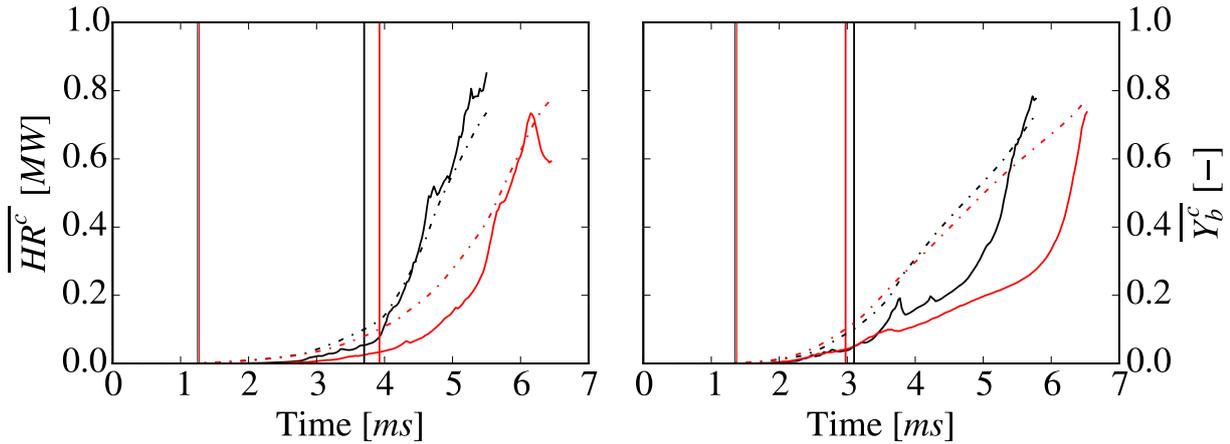


FIGURE 8.4 – Évolution temporelle du taux de dégagement de chaleur moyen (traits pleins) et de la fraction massique de gaz brûlés (traits pointillés) dans la chambre principale. Les traits verticaux représentent le T_{01} puis le T_{10} . — : chimie GRC « 2S_BE2 »; — : chimie ARC « SPK_21_219_11_QM ». Gauche : $d = 0.75$ mm; droite : $d = 1$ mm.

8.2.2.2 PRÉSENTATION DES RÉSULTATS

Les régimes de combustion et l'analyse réalisée en SECTION 8.2.1 sont toujours valides avec l'utilisation de la chimie ARC « SPK_21_219_11_QM » comme le montre les visualisations FIG. 8.5 et FIG. 8.6 pour les diamètres $d = 1$ mm et $d = 0.75$ mm par exemple. Néanmoins, le processus de combustion semble être plus lent lors de l'utilisation de la chimie ARC. FIG. 8.4 conforte cette analyse visuelle. En effet, les profils de taux de dégagement de chaleur moyen et de fraction massique de gaz brûlés dans la chambre principale démontrent une combustion plus tardive et moins vive. Par ailleurs, la température des gaz brûlés dans la préchambre est moins importante avec la chimie ARC. Ces différences peuvent se justifier par la réponse aux effets de courbure et d'étirement de la flamme différente selon l'utilisation des deux chimies. Lorsque le front de flamme subit des effets de courbure et d'étirement (comme c'est le cas lors d'une expansion d'une flamme cylindrique), la température de fin de combustion peut être inférieure à la température de fin de combustion d'une flamme plane laminaire [153]. Les vitesses de consommations varient également.

8.2.2.3 SYNTHÈSE

Les résultats confortent l'analyse réalisée SECTION 8.2.1 et ne changent pas le caractère qualitatif de cette dernière. Néanmoins, le caractère quantitatif des simulations est remis en question. Afin d'apporter des réponses aux différences visualisées, il semble nécessaire de se rapprocher de cas canoniques afin d'étudier sur une configuration simple la réponse aux effets d'étirement et de courbure de flammes dont la chimie est décrite par les deux schémas étudiés. Ce sera l'objet d'un travail futur.

8.3 ÉTUDE DE L'INFLUENCE DE LA POSITION DE L'ALLUMAGE INITIAL

Cette section présente une étude sur l'influence de la position de l'allumage initial par bougie dans la préchambre de combustion. Il s'agit de comparer deux configurations d'allumage initial :

- un allumage au centre de la préchambre de combustion ;
- un allumage à l'arrière de la préchambre de combustion, à 2 mm de la paroi.

8.3.1 CONFIGURATION DU CALCUL

L'étude est réalisée dans la même configuration que SECTION 8.2.1, présentée SECTION 8.2.1.1. La chimie GRC suffit à réaliser une analyse relative entre les deux configurations.

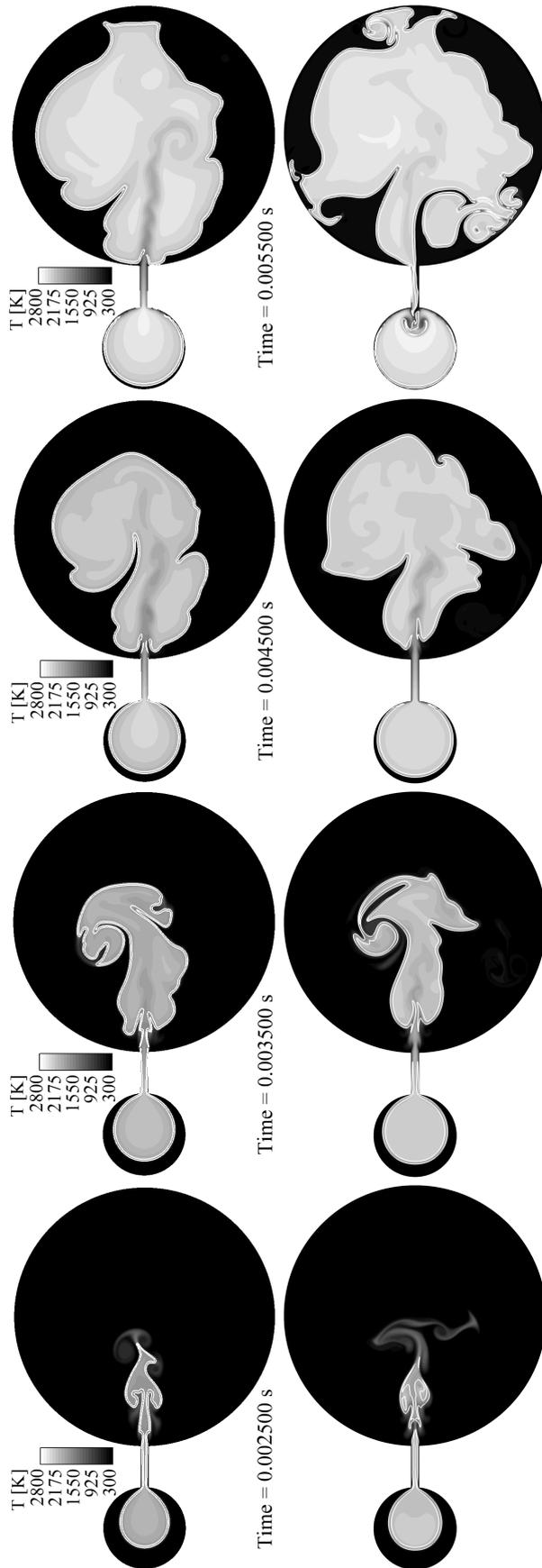


FIGURE 8.5 – Visualisation de la température et d'un iso contour à $HR = 10^8 \text{ W m}^{-3}$ pour $d = 1 \text{ mm}$ et 4 instants différents. Condition initiale : $P = 1 \text{ bar}$, $K = 300 \text{ K}$ et $\Phi = 1$. Haut : chimie ARC « SPK_21_219_11_QM »; bas : chimie GRC « 2S_BE2 ».

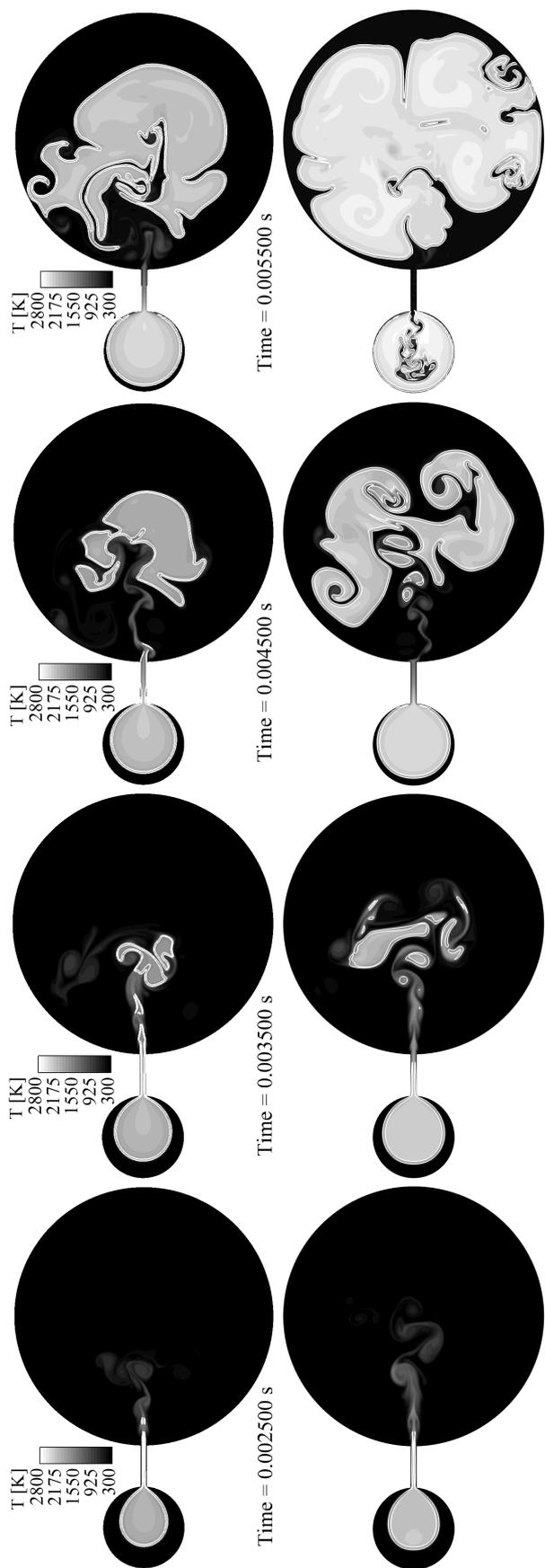


FIGURE 8.6 – Visualisation de la température et d'un iso contour à $HR = 10^8 \text{ W m}^{-3}$ pour $d = 0.75 \text{ mm}$ et 4 instants différents. Condition initiale : $P = 1 \text{ bar}$, $K = 300 \text{ K}$ et $\Phi = 1$. Haut : chimie [ARC](#) « SPK_21_219_11_QM » ; bas : chimie [GRC](#) « 2S_BE2 ».

8.3.2 PRÉSENTATION DES RÉSULTATS

En toute logique, l'allumage initial à l'arrière de la préchambre implique des valeurs de T_{01} plus élevées (cf. FIG. 8.7) : les gaz brûlés sont éjectés plus tardivement dans la chambre principale car la distance à parcourir jusqu'à la sortie de l'orifice est plus importante. Le délai d'allumage de la charge principale τ_i (cf. FIG. 8.9) est légèrement plus important lorsque l'allumage initial est positionnée à l'arrière de la préchambre. Dans le cas $d = 0.75$ mm, lors d'un allumage initial à l'arrière de la préchambre, l'allumage de la chambre principale est un échec. FIG. 8.10 présente une diminution des durées de combustion τ_b lorsque l'allumage est positionné à l'arrière de la préchambre. La diminution est marginale dans le cas $d = 2$ mm (-0.32 ms), mais plus importante dans le cas $d = 1$ mm (-1.02 ms).

FIG. 8.11 à FIG. 8.13 présente l'évolution temporelle de grandeurs caractéristiques pouvant expliquer les tendances obtenues FIG. 8.7 à FIG. 8.10. En effet, FIG. 8.11 fait apparaître une nette augmentation de l'énergie cinétique moyenne dans la chambre principale lorsque l'allumage est positionné à l'arrière de la préchambre de combustion. Le cas le plus remarquable est le cas $d = 0.75$ mm pour lequel l'énergie cinétique moyenne est près de 10 fois plus importante à T_{10} (i.e. lorsque les gaz brûlés débouchent dans la chambre principale) avec un allumage en arrière de la préchambre. Cette énergie cinétique favorise la combustion turbulente du mélange principal, ce qui a pour effet de diminuer le temps de combustion de la charge principale. Néanmoins, si l'énergie cinétique est trop importante avant d'atteindre le T_{10} , le mélange trop rapide des gaz brûlés avec les gaz frais est néfaste à l'initiation de la combustion. C'est ce qui peut être aperçu FIG. 8.9 où les délais d'allumage sont augmentés jusqu'à ne plus permettre l'allumage pour le cas $d = 0.75$ mm.

L'augmentation de l'énergie cinétique moyenne dans la chambre principale est principalement due à une injection de quantité de mouvement plus importante (cf. FIG. 8.12). En effet, l'allumage en arrière permet une combustion plus rapide de la charge de la préchambre comme le montre l'évolution temporelle de la fraction massique de gaz brûlés dans la préchambre FIG. 8.12. Il s'en suit un différentiel de pression plus important, visible FIG. 8.13 pour les diamètres de 0.75 mm et de 1 mm (le cas $d = 2$ mm présente des oscillations qui rendent la lecture impossible). Ce différentiel de pression plus important permet une éjection des gaz plus rapide et une augmentation de la quantité de mouvement à l'orifice. Le moment où la quantité de mouvement est la plus importante coïncide avec le moment où l'augmentation de l'énergie cinétique moyenne dans la chambre principale est la plus forte. Dès que le T_{01} est atteint, la quantité de mouvement chute fortement due à l'éjection de gaz brûlés de masse volumique plus faible. L'énergie cinétique moyenne dans la préchambre cesse alors de croître aussi fortement, ce qui démontre que la quantité de mouvement à l'orifice est un paramètre de contrôle de l'évolution de l'énergie cinétique contenue dans la chambre principale.

8.3.3 SYNTHÈSE

L'initiation de la combustion à l'arrière de la préchambre de combustion permet une combustion plus rapide dans la préchambre de combustion. Cette combustion plus rapide implique un différentiel de pression plus élevé, qui implique une éjection des gaz plus importante. La quantité de mouvement à l'orifice est alors fortement augmentée ce qui a pour effet d'accroître l'énergie cinétique moyenne dans la chambre principale. Cette énergie cinétique plus importante perturbe l'allumage de la chambre principale (i.e. le délai τ_i) jusqu'à ne pas permettre l'allumage si le mélange entre les gaz brûlés et les gaz frais est trop rapide (cas $d = 0.75$ mm). Néanmoins, quand l'allumage est permis (i.e. T_{10} atteint), la durée de la combustion τ_b est fortement réduite. Sont en cause les effets de la combustion turbulente, soutenue par l'énergie cinétique plus importante.

L'allumage à l'arrière de la préchambre de combustion semble alors bénéfique à la rapidité de la combustion de la charge principale lorsqu'elle est initiée. Néanmoins, le mélange trop rapide peut empêcher l'initiation de la combustion : c'est le mécanisme **M2** décrit SECTION 4.1. Les gaz brûlés se mélangent trop rapidement avec les gaz frais et n'induisent pas la thermique nécessaire à la combustion (le rapport entre le temps caractéristique de mélange τ_t et le temps caractéristique chimique τ_c favorise le mélange avant la réaction chimique).

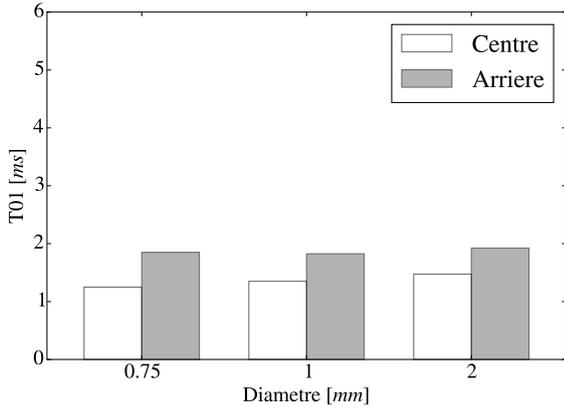


FIGURE 8.7 – Temps pour lequel la fraction massique de gaz brûlés dans la chambre principale est de 0.1 % soit $\bar{Y}_b^c = 0.001$. Centre (resp. Arrière) *i.e.* allumage au centre (resp. arrière) de la préchambre.

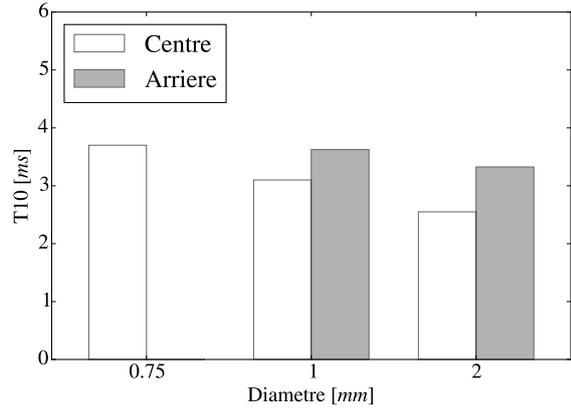


FIGURE 8.8 – Temps pour lequel la fraction massique de gaz brûlés dans la chambre principale est de 10 % soit $\bar{Y}_b^c = 0.1$. Centre (resp. Arrière) *i.e.* allumage au centre (resp. arrière) de la préchambre.

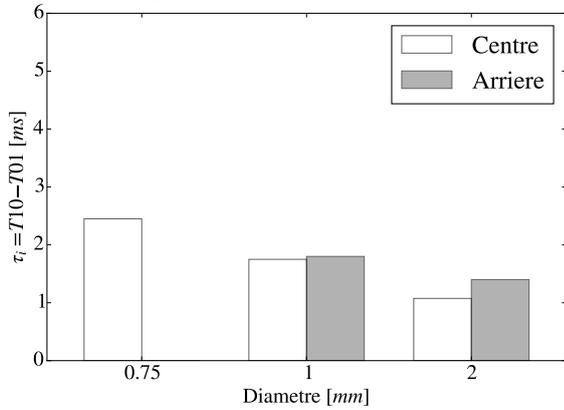


FIGURE 8.9 – Temps d'allumage de la chambre principale défini comme $T10 - T01$. $T10$ est le temps tel que $\bar{Y}_b^c = 0.1$ et $T01$ est le temps tel que $\bar{Y}_b^c = 0.001$. Centre (resp. Arrière) *i.e.* allumage au centre (resp. arrière) de la préchambre.

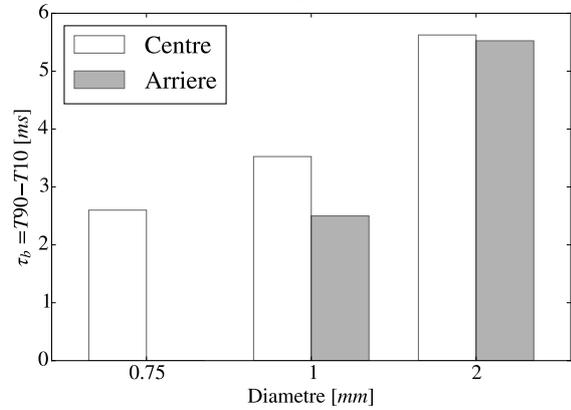


FIGURE 8.10 – Temps de combustion de la chambre principale défini comme $T90 - T10$. $T90$ est le temps tel que $\bar{Y}_b^c = 0.9$ et $T10$ est le temps tel que $\bar{Y}_b^c = 0.1$. Centre (resp. Arrière) *i.e.* allumage au centre (resp. arrière) de la préchambre.

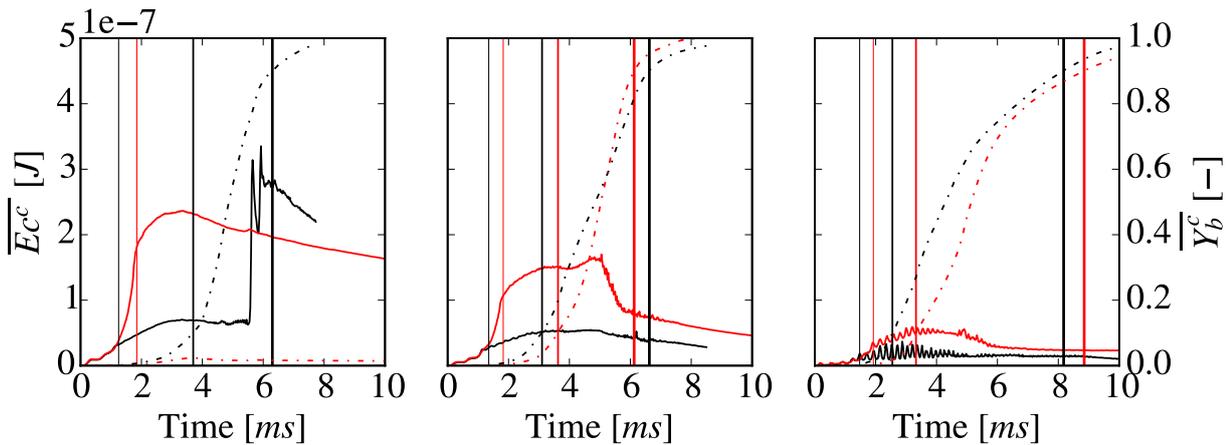


FIGURE 8.11 – Évolution temporelle de l'énergie cinétique moyenne $\bar{E}_{C^c} = 1/V^c \int_{V^c} 1/2 \cdot m \cdot (\sum_{i=1}^{Ndim} u_i^2) \delta V$ et de la fraction massique de gaz brûlés dans la chambre principale. Les traits verticaux représentent le $T01$, le $T10$ puis $T90$. — : allumage au centre de la préchambre; - - : allumage à l'arrière de la préchambre. Gauche : $d = 0.75$ mm; centre : $d = 1$ mm; droite : $d = 2$ mm.

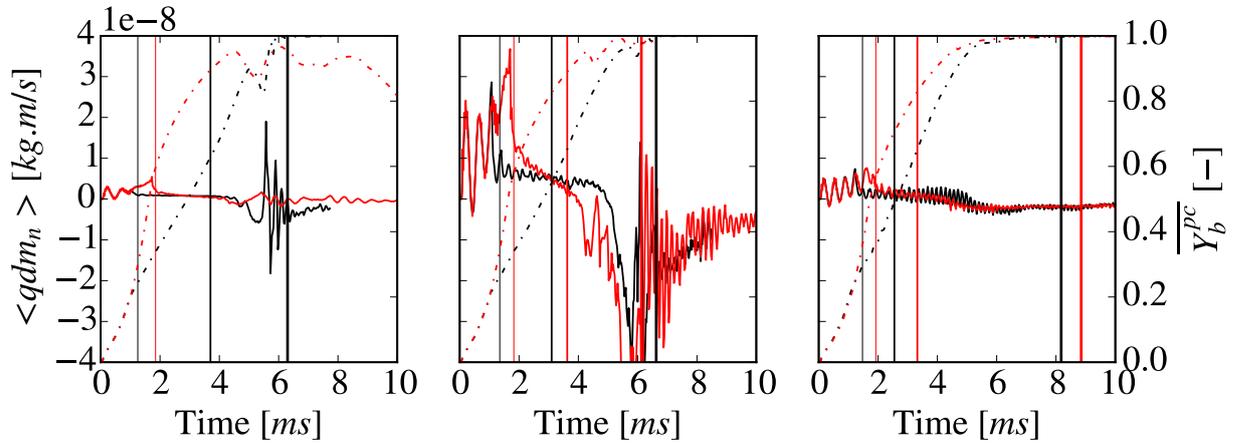


FIGURE 8.12 – Évolution temporelle de la quantité de mouvement à la sortie de l’orifice de la préchambre dans sa direction normale et de la fraction massique de gaz brûlés dans la préchambre. Les traits verticaux représentent le T_{01} , le T_{10} puis T_{90} . — : allumage au centre de la préchambre; — : allumage à l’arrière de la préchambre. Gauche : $d = 0.75$ mm; centre : $d = 1$ mm; droite : $d = 2$ mm.

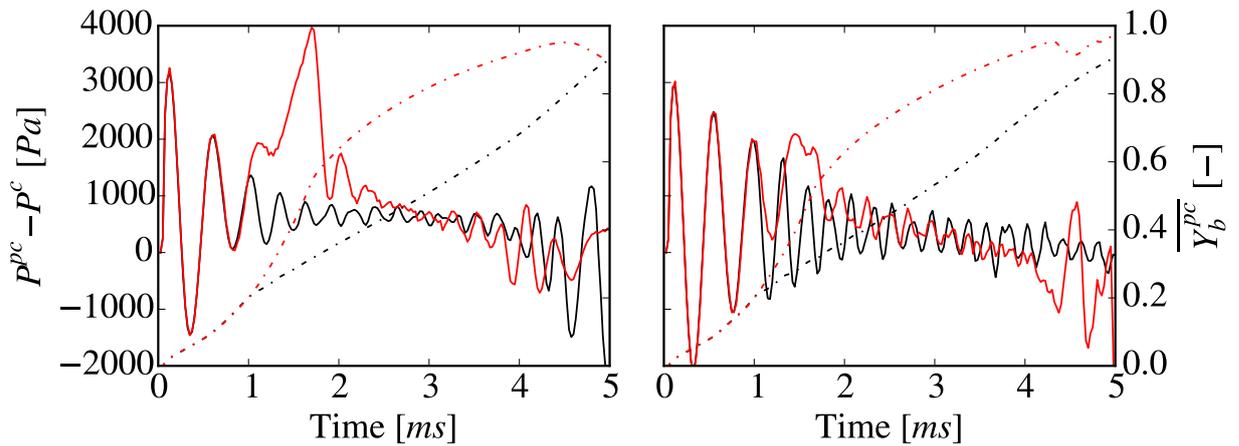


FIGURE 8.13 – Évolution temporelle de la différence de pression entre la préchambre et la chambre de combustion principale et de la fraction massique de gaz brûlés dans la préchambre. — : allumage au centre de la préchambre; — : allumage à l’arrière de la préchambre. Gauche : $d = 0.75$ mm; droite : $d = 1$ mm.

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

9.1 CONCLUSION

Tout au long de ce document, une étude sur l'allumage par jets turbulents dans les MCI est menée. Tout d'abord, la première partie du document introduit le sujet de recherche dans son contexte général. Les objectifs du développement de la technologie sont exposés avant une présentation plus détaillée de cette dernière. Un état de l'art sur l'allumage à l'aide d'une préchambre de combustion est présenté où des notions très utiles sont abordées comme par exemple la classification des régimes d'allumage de Yamaguchi *et al.* [190] synthétisée par TAB. 2.2 et utilisée au cours de l'étude. Enfin, la problématique est énoncée de façon synthétique avant la présentation des axes de recherche. Un schéma de l'organisation du travail est présenté FIG. 4.3. Ce schéma est essentiel à la compréhension de l'articulation des travaux présentés. Par la suite, la deuxième partie du document synthétise une partie du travail réalisé en ce qui concerne l'étude du système à l'aide de cas simplifiés bidimensionnels. Le comportement de la chimie utilisée est préalablement étudiée en ce qui concerne les vitesses de flammes laminaires, les températures adiabatiques de fin de combustion, les épaisseurs de flammes laminaires ainsi que les délais d'auto-inflammation et les délais d'inflammation par mélange de gaz brûlés et de gaz frais. Ensuite, les limites en taille de conduit pour la propagation d'une flamme ainsi que pour l'allumage d'une chambre à pression constante sont établies. Enfin, une étude de l'allumage d'une chambre de volume constant est réalisée. Cette dernière étude propose une analyse des régimes de combustion avec chimie de type GRC et ARC ainsi qu'une analyse de l'influence de la position de l'allumage initial par bougie dans la préchambre de combustion sur le processus de combustion.

Les études simplifiées de propagation de flamme et d'allumage de chambre à pression constante par jet de gaz chaud permettent d'appréhender les limites en taille de conduit plaçant le système dans un régime d'allumage particulier. En effet, les limites établies se sont trouvées être vérifiées lors de l'application sur une chambre de volume constant. Lors de la première phase de la combustion (lorsque la chambre principale n'est pas encore allumée), le gradient de pression dans cette dernière n'est pas encore très élevé ce qui rapproche le cas de l'étude à pression constante.

L'étude dans une chambre de volume constant permet, bien que réalisée dans une configuration académique, de retrouver des phénomènes physiques observés expérimentalement sur des moteurs à chambres divisées dès les années 1980. Deux des régimes d'allumage proposés par Yamaguchi *et al.* [190] sont observés par simulation numérique. Les oscillations dues à l'allumage en chambre divisée étudiées par Gupta *et al.* [79] sont également observées dans les simulations numériques à l'aide de la formulation compressible du code AVBP qui permet l'étude des phénomènes acoustiques.

L'ensemble de ces résultats sont encourageants et justifient l'étude de ces phénomènes instationnaires et multi-physiques par calculs numériques à l'aide du code de simulation aux grandes échelles d'écoulement fluide compressible et réactif AVBP. Aujourd'hui, la puissance de calcul disponible rend possible l'étude paramétrique d'un tel système.

9.2 PERSPECTIVES

MÉLANGE PAUVRE L'étude décrite au cours de ce document est réalisée à la stoechiométrie. L'allumage par jets turbulents étant développé pour l'allumage de mélange pauvre homogène, il est primordial de dériver la présente étude à des richesses inférieures à l'unité.

RAPPORT DE VOLUME L'étude réalisée sur la chambre à volume constant doit être effectuée, en plus des différentes richesses, pour plusieurs rapports de volume préchambre / chambre principale. En effet, Yamaguchi *et al.* [190] démontre un impact du rapport de volume sur le déroulement de l'allumage.

MULTIPLES JETS Les travaux sont réalisés avec un seul orifice produisant un unique jet. La technologie peut posséder plusieurs orifices afin de réduire le temps de combustion de la charge principale. En effet, si plusieurs foyers sont initiés à l'aide de multiples jets, le temps de parcours des flammes pour consommer la charge est moindre. Ces multiples orifices permettent d'évacuer les gaz brûlés de la préchambre plus rapidement et diminuent ainsi la montée en pression de cette dernière lors de la combustion ce qui résulte en une diminution des vitesses d'éjection des gaz. Le fait de rajouter des orifices a donc une influence directe sur la propagation individuelle d'un jet. Cette influence doit être quantifiée.

TURBULENCE INITIALE L'ensemble des cas présentés dans ce document sont réalisés avec un domaine initialement au repos. Lors de la séquence d'allumage d'un MCI, le mélange frais présent dans la chambre principale comporte des mouvements de petites et de grandes échelles. Typiquement, des mouvements de grandes échelles de type *swirl* et/ou *tumble* générés par la géométrie du moteur sont présents dans la chambre de combustion, en plus de mouvements turbulents aléatoires de petites échelles. Il est nécessaire d'évaluer l'impact de ces mouvements sur l'allumage de la chambre principale par jets turbulents. Le problème peut être divisé en deux parties : l'impact d'une turbulence de petite échelle et l'impact d'un mouvement de grande échelle.

CHIMIE ANALYTIQUEMENT RÉDUITE Les mécanismes (i) « *well dispersed burning* » et (ii) « *composite ignition* » proposés par Yamaguchi *et al.* [190] sont basés sur des mécanismes réactionnels complexes qui mènent à l'auto inflammation du mélange gaz brûlés - gaz frais. Afin de reproduire ces mécanismes de façon quantitative, il est essentiel d'utiliser un schéma cinétique représentant correctement la physique mis en jeu. Pour cela, les schémas ARC sont parfaitement adaptés car ils permettent de conserver la physique des réactions jugées primordiales lors du processus d'optimisation réalisée par l'outil YARC développé par P. Pepiot-Desjardins *et al.* [138]. SECTION 8.2.2 appréhende l'influence de l'utilisation d'une chimie ARC en ne simulant qu'une partie du processus de combustion. Il est nécessaire d'approfondir cette étude en évaluant la réponse à l'étiement des flammes sur des cas canoniques et en simulant entièrement le processus de combustion.

MODÈLES SIMPLIFIÉS Afin d'étudier le régime (i) « *well dispersed burning* », il est possible d'imaginer découper le problème en deux parties distinctes :

- une partie agissant comme un « générateur » de gaz brûlés à $T = T_b^{out}$ (la préchambre) ;
- une partie agissant comme un réacteur homogène d'un mélange de gaz brûlés et de gaz frais (la chambre principale).

Un premier modèle peut fournir la température et la composition des gaz éjectés en fonction des paramètres géométriques et thermodynamiques de la préchambre. Un deuxième modèle peut fournir le délai d'inflammation le plus faible τ_I^{MR} en fonction de la température et de la composition des gaz éjectés et des gaz frais. Si ce délai d'inflammation est trop important par rapport au créneau de temps imparti pour l'allumage de la charge principale, alors l'allumage est un échec. Cette approche pourrait permettre d'établir une limite entre le régime (i) « *well dispersed burning* » et l'échec de l'allumage en fonction du mélange des gaz éjectés avec les gaz frais. Cette façon d'étudier le mécanisme semble très judicieuse puisqu'elle permet une étude séparée et simplifiée du problème. Ainsi, une chimie complexe peut être utilisée pour le réacteur homogène oD représentant la chambre principale.

COUPLAGE THERMIQUE AUX PAROIS Dans l'ensemble des travaux présentés, les parois sont maintenues à température constante par l'imposition du flux thermique nécessaire. En réalité, la température aux parois résulte du flux de chaleur transmis par le fluide et du flux de chaleur évacué par conduction dans le solide jusqu'au liquide de refroidissement. Les pertes thermiques aux parois sont responsables

du *quenching* de la flamme. Ainsi, la bonne estimation de ces dernières est d'une importance capitale dans nos calculs. L'impact de la résolution de la conduction solide sur les résultats présentés doit être évalué. AVBP ne résolvant pas la conduction dans les solides, un couplage doit être mis en place avec un deuxième code de calcul.

VOLUME DE LA CHAMBRE PRINCIPALE VARIABLE Dans la réalité, pendant le processus d'allumage, le MCI est en phase de compression et le mouvement du piston fait diminuer le volume de la chambre principale. Cela provoque une compression des gaz frais et un mouvement des gaz de la chambre principale vers la préchambre de combustion. Ce mouvement impacte le processus d'allumage et de combustion dans la préchambre. Après le point mort haut, le piston attaquant sa phase de descente peut assister l'éjection des gaz brûlés de la préchambre vers la chambre principale et ainsi affecter le processus de combustion dans son ensemble. Ces effets dus au volume de la chambre principale variable doivent être étudiés.

ÉTUDE DANS LE CAS D'UNE GÉOMÉTRIE DE MOTEUR RÉELLE Cette étude consiste en la déclinaison des résultats génériques sur une géométrie réelle et un cycle moteur complet. Ici, ce n'est plus une chambre carrée débitant dans un trou unique qui est considérée mais une géométrie réelle fournie par le groupe Renault. La géométrie de la chambre étant variable (mouvement du piston), les mécanismes physiques mis en évidence dans la première partie peuvent être perturbés. Cette deuxième partie est essentielle afin de dériver les concepts de la première partie du travail à des cas réels. Dans ces cas réels, la flamme se développant dans la chambre peut interagir avec le piston et, suivant l'avance à l'allumage, avoir lieu dans une chambre principale à pression croissante ou décroissante. Cette partie doit être réalisée à l'aide de simulations de type LES très résolues avec couplage thermique aux parois systématique et avec un maillage mobile : c'est un domaine que peu d'équipes au monde maîtrisent mais qui est maintenant usuel au CERFACS [181] [53] [51] [76] [126]. Le nouveau phénomène qui peut être alors simulé est la phase de vidange de la préchambre qui n'est pas équipée de soupapes et doit donc être vidangée et à nouveau alimentée en prémélange par les orifices. La capacité à étudier tous les mécanismes physiques présents sur géométrie réelle et sur un ou plusieurs cycles consécutifs est une autre spécificité de ce travail de recherche qui couvre donc des DNS dans des cas académiques jusqu'à des simulations de type LES de véritables MCI.

Troisième partie

ANNEXE : TRAVAUX COMPLÉMENTAIRES

MODÈLE 0D POUR L'ÉVOLUTION DE LA PRESSION LORS D'UNE COMBUSTION EN VOLUME SEMI CONFINÉ

Lors d'une combustion en volume semi confiné, la pression de fin de combustion peut atteindre des valeurs très élevées. En effet, pour une combustion à volume constant par exemple, l'application du premier principe de la thermodynamique procure une estimation du rapport de température en considérant cv constant

$$\frac{T_b}{T_i} = 1 + \frac{Q_r Y_f}{cv T_i}, \quad (\text{A.1})$$

en considérant un mélange de gaz parfait

$$\frac{P_b}{P_i} = \frac{r_b T_b}{r_u T_i} \simeq \frac{T_b}{T_i} = 1 + \frac{Q_r Y_f}{cv T_i}, \quad (\text{A.2})$$

ce qui procure un rapport de pression de l'ordre de 10 pour l'iso-octane à la stoechiométrie. En ordre de grandeur, la pression peut atteindre jusqu'à 10 fois la pression initiale, et ce pour le cas le plus critique d'une combustion à volume constant.

Pour des applications de type sécurité industrielle, la connaissance de la pression dans le volume semi confiné est essentielle afin de dimensionner correctement l'enceinte d'un bâtiment qui peut être exposé à ce type de problématique. Dans le cas de la présente étude, la connaissance de la pression dans la préchambre de combustion est un élément important afin de prédire l'apparition d'un amorçage à l'orifice de sortie et donc, la présence de chocs possible. Si des chocs sont présents, alors il est nécessaire de les traiter à l'aide de méthodes numériques adaptées.

De la théorie de la dynamique des gaz, un rapport de pression critique peut être exprimé, au delà duquel l'orifice est obligatoirement amorcé. En effet, en considérant un mélange de gaz parfait un écoulement 1D, sans échange de chaleur et une transformation réversible, dans le plan de l'orifice de sortie

$$\frac{P_t}{P} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} M^2\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}}, \quad (\text{A.3})$$

où P_t est la pression totale en amont, P est la pression statique dans le plan de l'orifice, M le nombre de Mach dans le plan de sortie de l'orifice, γ le rapport des capacités calorifiques supposé constant. Lorsque l'orifice est amorcé

$$\frac{P_t}{P_c} = \left(\frac{\gamma + 1}{2}\right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}}, \quad (\text{A.4})$$

avec P_c la pression critique pour laquelle l'orifice est amorcé. Un moyen simple de contrôler la présence d'un écoulement sonique dans le plan de sortie de l'orifice est donc l'évaluation du rapport $\frac{P_t}{P}$ au cours du temps. Pour cela, un code 0D peut être mis en place, moyennant quelques hypothèses.

A.1 SYSTÈME D'ÉQUATION AUX DÉRIVÉES ORDINAIRES

Le mécanisme physique de génération de pression dans le volume semi confiné est décrit par 5 équations aux dérivées ordinaires et N égalités. L'objectif de cette section est la présentation de l'établissement du système d'équations décrivant l'évolution de la pression au cours du temps.

A.1.1 CONSERVATION DE L'ÉNERGIE

Pour un écoulement réactif, l'équation de conservation de l'énergie peut s'écrire pour l'énergie sensible [148] selon :

$$\rho \frac{De_s}{Dt} = \dot{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i} \right) + \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + f_{vol}, \quad (\text{A.5})$$

où σ combine le tenseur des forces visqueuses et des forces de pression tel que $\sigma_{ij} = \tau_{ij} - p\delta_{ij}$, τ_{ij} est le tenseur des forces visqueuses tel que $\tau_{ij} = -\frac{2}{3}\mu \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} + \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$, f_{vol} est la puissance des forces volumiques appliquées aux espèces, \dot{Q} est un terme source de chaleur, $\rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i}$ est associé à la diffusion des espèces d'enthalpies différentes, $\dot{\omega}_T$ est le taux de dégagement de chaleur lié à la combustion, $\frac{D}{Dt}$ est la dérivée particulaire définie pour toute quantité f telle que

$$\rho \frac{Df}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial f}{\partial t} + u_i \frac{\partial f}{\partial x_i} \right) = \frac{\partial \rho f}{\partial t} + u_i \frac{\partial \rho u_i f}{\partial x_i}. \quad (\text{A.6})$$

Si les capacités calorifiques des espèces sont égales et indépendantes de la température, [EQ. A.5](#) est une équation décrivant l'évolution de la pression. En effet, utilisant l'expression de ρe_s

$$\rho e_s = \rho \left(\int_{T_0} T c_v dT - RT_0/W \right) = \rho (c_v T - c_p T_0) = p/(\gamma - 1) - \rho c_p T_0 \quad (\text{A.7})$$

et en utilisant l'équation de conservation de la masse, alors [148] :

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\gamma - 1} P \right) = \dot{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q} + f_{vol} - \frac{\lambda}{\lambda - 1} P \frac{\partial u_i}{\partial x_i}. \quad (\text{A.8})$$

Afin d'obtenir une équation pour l'évolution de la pression moyenne à l'intérieur du volume semi confiné, il est possible d'intégrer [EQ. A.8](#) sur le volume semi confiné V_{pc} , volume de contrôle fixe par rapport au temps. Différents termes apparaissent alors :

— variation temporelle de la pression moyenne dans la préchambre :

$$\iiint_{V_{ch}} \left[\frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\gamma - 1} P \right) \right] dV = \frac{D}{Dt} \left(\overline{\frac{1}{\gamma - 1} P} \right) V_{ch}, \quad (\text{A.9})$$

où \bar{f} est la moyenne de la quantité f dans le volume semi confiné.

— aération du volume semi confiné :

$$\begin{aligned} \iiint_{V_{ch}} \left[-\frac{\gamma}{\gamma - 1} P \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right] dV &= \iiint_{V_{ch}} \left[-\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} P u_i \right) \right] dV \\ &\quad + \underbrace{\iiint_{V_{ch}} \left[u_i \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} P \right) \right] dV}_{=0 \text{ en supposant la pression homogène dans la préchambre}} \\ &= \iint_{\delta V_{ch}} \left[-\frac{\gamma}{\gamma - 1} P \vec{U} \right] \cdot \vec{dS} \\ &= - \left\langle \frac{\gamma}{\gamma - 1} P_{ext} U_n \right\rangle S, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

où $\langle f \rangle$ est la moyenne de la quantité f dans le plan de sortie, U_n est la norme de la vitesse normale au plan de sortie et S la section de sortie.

— dégagement d'énergie due à la combustion :

$$\iiint_{V_{ch}} \dot{\omega}_T dV = \overline{\dot{\omega}_T} V_{ch}. \quad (\text{A.11})$$

Les contraintes visqueuses et les forces volumiques sont négligées. Le terme source d'apport de chaleur extérieure est nul s'il l'on ne prend pas en compte l'allumage du mélange. Alors, [EQ. A.8](#) peut s'écrire :

$$\frac{D}{Dt} \left(\frac{1}{\gamma-1} P \right) V_{ch} = \overline{\dot{\omega}_T} V_{ch} - \underbrace{\left\langle \frac{\gamma}{\gamma-1} P_{ext} U_n \right\rangle}_S S. \quad (\text{A.12})$$

[EQ. A.12](#) décrit alors la variation de la pression moyenne dans la préchambre en fonction de l'apport d'énergie lié à la combustion du mélange et de la perte d'énergie liée à la fuite de gaz à la sortie de la préchambre. En supposant les coefficients thermodynamiques constants et en ajoutant un coefficient de débit c_d au terme d'aération :

$$\frac{d\overline{P}}{dt} = \frac{1}{\gamma-1} \underbrace{\overline{\dot{\omega}_T}}_{\text{combustion}} - \frac{1}{\gamma-1} \underbrace{\left\langle \frac{\gamma}{\gamma-1} P_{ext} U_n \right\rangle}_S + S c_d \frac{1}{V_{ch}}. \quad (\text{A.13})$$

DÉGAGEMENT DE CHALEUR DANS LA PRÉCHAMBRE Le terme $\overline{\dot{\omega}_T}$ peut s'écrire

$$\overline{\dot{\omega}_T} = Qr \frac{Y_f}{W_f} \rho_u S_L S_{flamme} \frac{1}{V_{ch}}, \quad (\text{A.14})$$

où $\rho_u S_L S_{flamme}$ est le débit de mélange traversant la flamme de surface S_{flamme} et de vitesse de consommation S_L . Qr est l'énergie dégagée par la combustion d'une mole de carburant.

VITESSE D'ÉJECTION DES GAZ EN SORTIE DE LA PRÉCHAMBRE A partir de la théorie de la dynamique des gaz, en considérant un gaz parfait à rapport de capacités calorifiques constant, la vitesse d'éjection des gaz en sortie peut s'écrire :

$$U_n = \sqrt{\frac{2\gamma_{out}}{\gamma_{out}-1} r_{out} T_{out} \left(\left(\frac{\overline{P}}{P_{ext}} \right)^{(\gamma_{out}-1)/\gamma_{out}} - 1 \right)} \quad (\text{A.15})$$

A.1.2 CONSERVATION DE LA MASSE

Les équations d'évolution de masse sont exposées ci-dessous.

— Pour la masse totale :

$$\frac{dm}{dt} = -\rho_{out} U_n c_d S. \quad (\text{A.16})$$

— Pour la masse de gaz brûlés :

$$\frac{dm_b}{dt} = \rho_u S_L S_{flamme} \text{ si il sort des gaz frais} \quad (\text{A.17})$$

$$\frac{dm_b}{dt} = \rho_u S_L S_{flamme} - \rho_{out} U_n c_d S \text{ si il sort des gaz brûlés} \quad (\text{A.18})$$

— Pour la masse du carburant :

$$\frac{dm_f}{dt} = -\rho_u Y_f S_L S_{flamme} - Y_f \rho_{out} U_n c_d S \text{ si il sort des gaz frais} \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{dm_f}{dt} = -\rho_u Y_f S_L S_{flamme} \text{ si il sort des gaz brûlés} \quad (\text{A.20})$$

A.1.3 ÉQUATIONS D'ÉTAT

En supposant un mélange de gaz parfait,

$$\bar{P} = \rho_b r_b T_b, \quad (\text{A.21})$$

$$\bar{P} = \rho_u r_u T_u. \quad (\text{A.22})$$

A.1.4 ÉVOLUTION GÉOMÉTRIQUE

Dans ce modèle, la flamme est supposée cylindrique. La surface de flamme s'écrit alors

$$S_{flamme} = 2\pi R. \quad (\text{A.23})$$

L'évolution du rayon est gouvernée par la vitesse de déplacement du front de flamme, approximée par

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\rho_u}{\rho_b} S_L, \quad (\text{A.24})$$

où S_L est approximée par la vitesse de consommation d'une flamme laminaire plane.

L'étirement de la flamme peut s'écrire

$$\kappa = \frac{1}{S_{flamme}} \frac{dS_{flamme}}{dt} = \frac{1}{R} \frac{dR}{dt}. \quad (\text{A.25})$$

La vitesse de consommation peut s'exprimer en fonction de la vitesse de consommation laminaire d'une flamme plane et de la longueur de Markstein :

$$S_c = S_L^0 \left(1 - \frac{L_a}{S_L^0} \kappa \right). \quad (\text{A.26})$$

L'étirement de la flamme est très fort pour de petits rayons, lorsque la flamme commence à se développer : la vitesse de consommation est alors éloignée de la vitesse de consommation d'une flamme laminaire plane pour ces instants. Ce point est un biais du modèle qui peut être corrigé en prenant en compte ces effets d'étirements.

A.1.5 ÉVOLUTIONS LORS DE COMPRESSIONS ET DE DÉTENTES

La compression des gaz frais est supposée isentropique, alors :

$$\rho_u = \rho_{init} \left(\frac{\bar{P}}{P_{init}} \right)^{1/\gamma_u}. \quad (\text{A.27})$$

$$(\text{A.28})$$

La détente entre la préchambre et la sortie de la préchambre est supposée isentropique. Si des gaz frais sont éjectés :

$$\rho_{out} = \rho_u \left(\frac{P_{ext}}{\bar{P}} \right)^{1/\gamma_u}, \quad (\text{A.29})$$

$$T_{out} = T_u \left(\frac{P_{ext}}{\bar{P}} \right)^{(\gamma_u-1)/\gamma_u}. \quad (\text{A.30})$$

Si des gaz brûlés sont éjectés :

$$\rho_{out} = \rho_b \left(\frac{P_{ext}}{\bar{P}} \right)^{1/\gamma_b}, \quad (\text{A.31})$$

$$T_{out} = T_b \left(\frac{P_{ext}}{\bar{P}} \right)^{(\gamma_b-1)/\gamma_b}. \quad (\text{A.32})$$

A.1.6 COEFFICIENTS THERMODYNAMIQUES

Les valeurs de c_p , c_v et γ sont calculées en fonction de la composition et de la température à l'aide de tables JANNAF.

A.1.7 TEMPÉRATURE FIN DE COMBUSTION ET VITESSE DE FLAMME

La température fin de combustion et la vitesse de flamme sont tabulées en fonction des conditions de pression et de température dans les gaz frais. La tabulation est générée à l'aide de flammes 1D laminaires à pression constante. En supposant une compression isentropique des gaz frais, on a alors $S_L^0 = f(\bar{P})$ et $T_b = f(\bar{P})$.

A.1.8 SYNTHÈSE

Un système d'équation peut alors être établi afin d'évaluer la pression moyenne dans la préchambre au cours du temps :

$$\left\{ \begin{array}{l}
 \frac{d\bar{P}}{dt} = \overline{\gamma - 1} Q_r \frac{Y_f}{W_f} \rho_u S_L S_{flamme} \frac{1}{V_{ch}} - \overline{\gamma - 1} < \frac{\gamma}{\gamma - 1} P_{ext} U_n > c_d S \frac{1}{V_{ch}} \\
 \frac{dm}{dt} = -\rho_{out} U_n c_d S \\
 \frac{dm_b}{dt} = \rho_u S_L S_{flamme} & \text{si il sort des gaz frais} \\
 \frac{dm_b}{dt} = \rho_u S_L S_{flamme} - \rho_{out} U_n c_d S & \text{si il sort des gaz brulés} \\
 \frac{dm_f}{dt} = -\rho_u Y_f S_L S_{flamme} - Y_f \rho_{out} U_n c_d S & \text{si il sort des gaz frais} \\
 \frac{dm_f}{dt} = -\rho_u Y_f S_L S_{flamme} & \text{si il sort des gaz brulés} \\
 \frac{dR}{dt} = \frac{\rho_u}{\rho_b} S_L \\
 S_{flamme} = 2\pi R \\
 U_n = \sqrt{\frac{2\gamma_{out}}{\gamma_{out} - 1} r_{out} T_{out} \left(\left(\frac{\bar{P}}{P_{ext}} \right)^{(\gamma_{out}-1)/\gamma_{out}} - 1 \right)} \\
 \bar{P} = \rho_b r_b T_b \\
 \bar{P} = \rho_u r_u T_u \\
 \rho_{out} = \rho_u \left(\frac{P_{ext}}{\bar{P}} \right)^{1/\gamma_u} & \text{si il sort des gaz frais} \\
 T_{out} = T_u \left(\frac{P_{ext}}{\bar{P}} \right)^{(\gamma_u-1)/\gamma_u} & \text{si il sort des gaz frais} \\
 \rho_{out} = \rho_b \left(\frac{P_{ext}}{\bar{P}} \right)^{1/\gamma_b} & \text{si il sort des gaz brulés} \\
 T_{out} = T_b \left(\frac{P_{ext}}{\bar{P}} \right)^{(\gamma_b-1)/\gamma_b} & \text{si il sort des gaz brulés} \\
 \rho_u = \rho_{init} \left(\frac{\bar{P}}{P_{init}} \right)^{1/\gamma_u} \\
 S_L = f(\bar{P}) \\
 T_b = f(\bar{P})
 \end{array} \right.$$

Ce système est composé de 14 équations et de 14 inconnues : \bar{P} , ρ_u , S_L , S_{flamme} , U_n , ρ_{out} , m , m_b , m_f , R , ρ_b , T_{out} , T_b et T_u . Les coefficients thermodynamiques sont calculés en fonction de la composition et de la température à l'aide de tables JANNAF.

Afin de résoudre le système, les dérivées sont approximées par $\frac{df}{dt} \simeq \frac{f^{n+1}-f^n}{\Delta t}$ où f est une variable quelconque et Δt un pas de temps suffisamment petit. Ainsi, les variables au temps $n+1$ peuvent être approximées par $f^{n+1} = f^n + \Delta t \left. \frac{df}{dt} \right|_n$, où les dérivées sont évaluées au temps n . Par pas de temps successif, l'évolution de la pression moyenne dans la préchambre est alors connue jusqu'à ce que la masse de carburant initiale soit consommée.

 ÉTUDE DU COMPORTEMENT D'UNE CHIMIE ARC POUR LE PROPANE

Les expérimentations de Yamaguchi *et al.* [190] sont réalisées avec du propane comme carburant. Pour des raisons de comparaisons quantitatives avec les travaux de Yamaguchi *et al.*, des simulations avec propane comme carburant sont nécessaires. L'objectif est d'utiliser un schéma de type ARC déjà dérivé par F. Collin-Bastiani (travaux non publiés). Avant d'utiliser ce schéma, il est nécessaire d'évaluer la validité des grandeurs d'intérêt primordiales comme la vitesse de consommation, l'épaisseur de flamme thermique et la température adiabatique de fin de combustion. Le cas étudié présente des phénomènes d'auto-inflammation assisté par mélange de radicaux et réactions chimiques en chaîne : il est alors impératif d'étudier le comportement du schéma cinétique face à ces processus.

Le schéma de cinétique chimique choisi comme référence pour le propane est un schéma réduit noté « LLNL_215_2610 » (215 espèces et 2610 réactions) issu d'un schéma détaillé des laboratoires de Lawrence Livermore [36] comportant près de 860 espèces et 3600 réactions. Le schéma détaillé « LLNL_215_2610 » est à l'origine prévu pour décrire la chimie de l'iso-octane et du n-heptane. Cependant, il décrit correctement la chimie du propane comme le montre les travaux de B. Enaux [50] et de F. Collin-Bastiani (non publiés). FIG. B.1 et FIG. B.2 renforce cette conclusion en proposant une comparaison des vitesses de consommation issues de simulations de flamme 1D et les délais d'auto-inflammation issus de simulations de réacteur homogène 0D du schéma « LLNL_215_2610 » avec des expérimentations pour certaines conditions initiales.

TAB. B.1 présente un tableau des différents schémas pour le propane utilisés dans cette étude. FIG. B.3 à FIG. B.8 présente l'évolution des principales grandeurs d'intérêt pour les schémas.

B.1 CHIMIE ANALYTIQUEMENT RÉDUITE

Un schéma ARC noté « 24_296_17 » a été dérivé à partir du schéma « LLNL_215_2610 » par F. Collin-Bastiani. L'outil YARC [139] a été utilisé pour assurer le processus de réduction. Les cas canoniques cibles sont des flammes 1D à pression et température atmosphérique. Cette section s'attarde à valider ce schéma par rapport au schéma de référence.

B.1.1 VALIDATION DES GRANDEURS D'INTÉRÊT

VITESSE DE FLAMME, ÉPAISSEUR DE FLAMME ET TEMPÉRATURE ADIABATIQUE DE FIN DE COMBUSTION FIG. B.3, FIG. B.4 et FIG. B.5 présentent les vitesses de consommation, les épaisseurs de flamme et les températures adiabatiques de fin de combustion issues de simulations de flamme 1D

SCHÉMA	NOMBRE D'ESPÈCES TRANSPORTÉES	NOMBRE D'ESPÈCES QSS	NOMBRE DE RÉACTIONS	SOURCE
LLNL_215_2610	215	-	2610	CERFACS
24_296_17	24	17	296	CERFACS

TABLE B.1 – Tableau des schémas de cinétique chimique utilisés pour le propane.

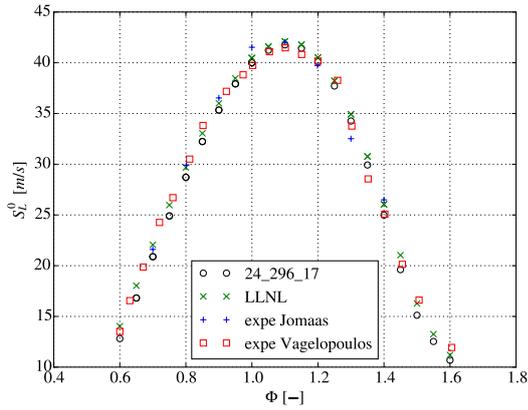


FIGURE B.1 – Vitesses de flamme laminaire d'un mélange propane/air issues de simulation de flamme 1D CANTERA [70] et d'expérimentation : Jomaas *et al.* [93] et Vagelopoulos *et al.* [179]. $P = 1$ bar et $T_u = 300$ K.

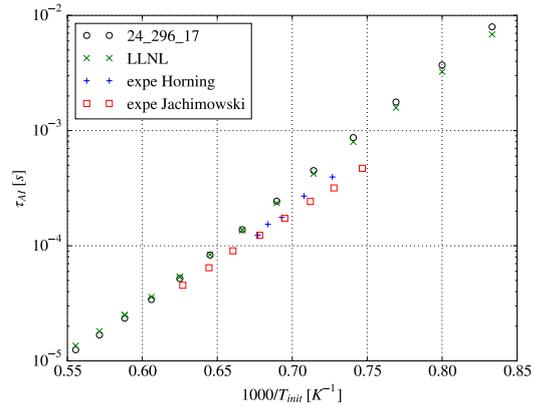


FIGURE B.2 – Délais d'auto-inflammation τ_{AI} d'un mélange propane/air basés sur $\max(\dot{\omega}_{OH})$ issus de simulations de réacteur homogène oD à pression constante CANTERA [70] et d'expérimentation : Horning *et al.* [86] et Jachimowski [90]. $P = 1$ bar et $\phi = 1.0$.

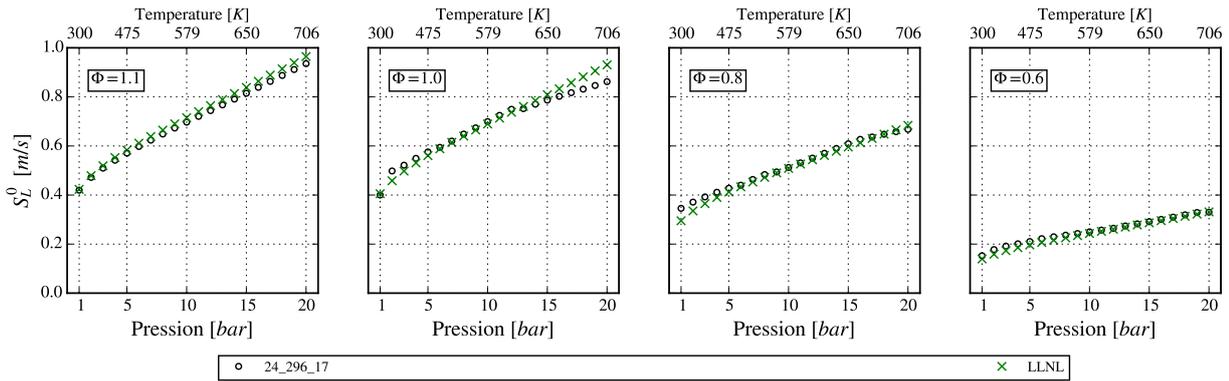


FIGURE B.3 – Vitesses de flamme laminaire d'un mélange propane/air issues de simulations de flamme 1D CANTERA [70]. La température initiale évolue avec la pression selon une compression isentropique avec $\gamma = 1.4$.

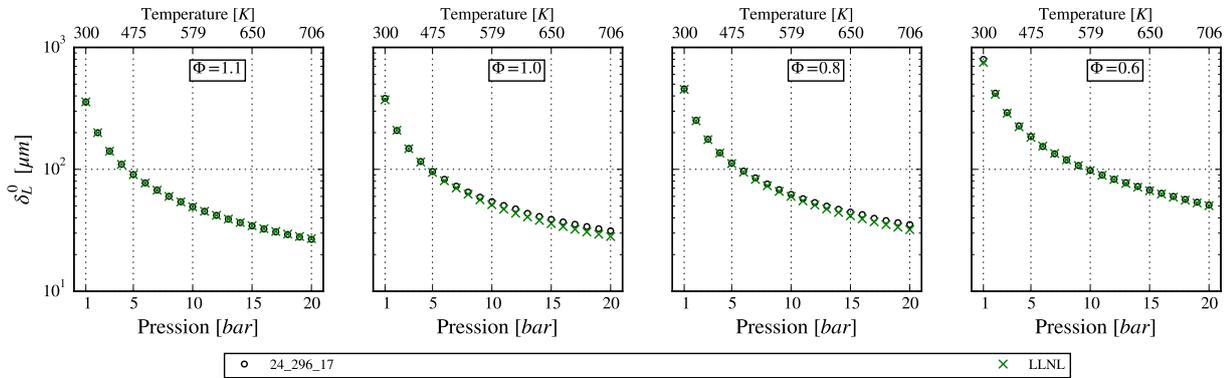


FIGURE B.4 – Epaisseurs de flamme laminaire d'un mélange propane/air issues de simulations de flamme 1D CANTERA [70]. La température initiale évolue avec la pression selon une compression isentropique avec $\gamma = 1.4$.

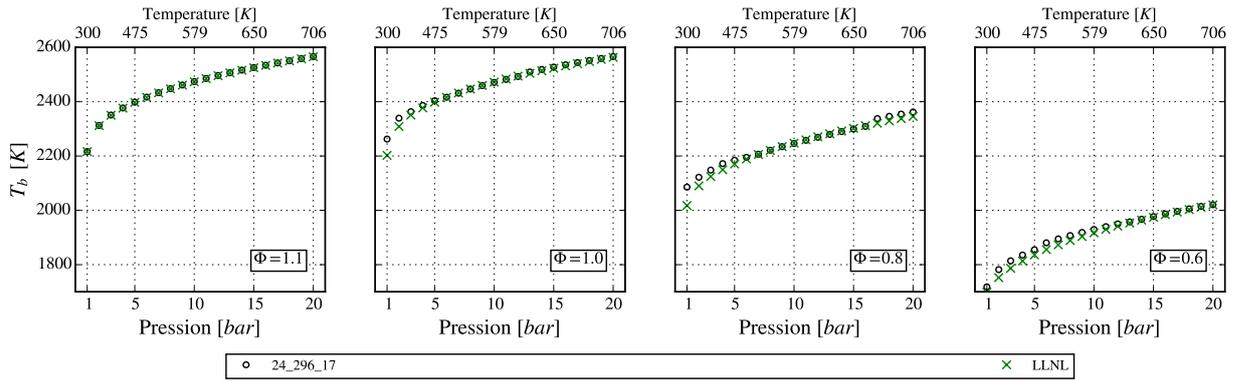


FIGURE B.5 – Températures de fin de combustion de flamme laminaire d'un mélange propane/air issues de simulations de flamme 1D CANTERA [70]. La température initiale évolue avec la pression selon une compression isentropique avec $\gamma = 1.4$.

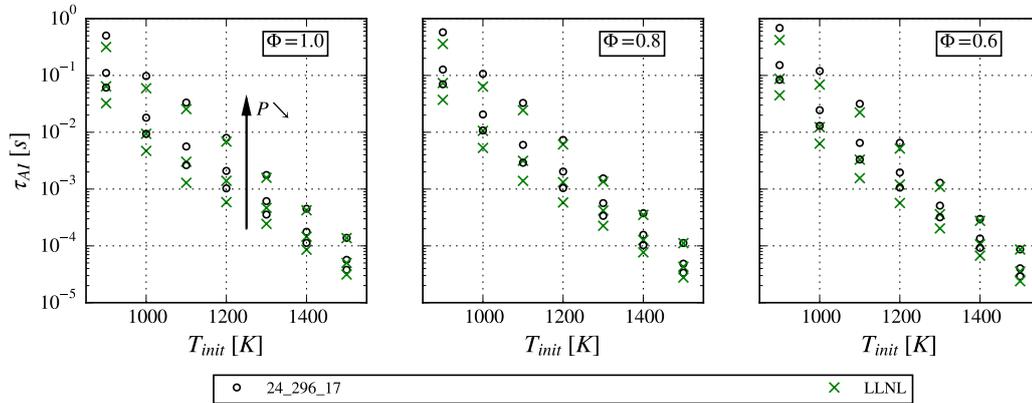


FIGURE B.6 – Délais d'auto-inflammation τ_{AI} d'un mélange propane/air basés sur $\max(\dot{\omega}_{OH})$ issus de simulations de réacteur homogène 0D à pression constante CANTERA [70]. $P = 1, 5$ et 10 bar.

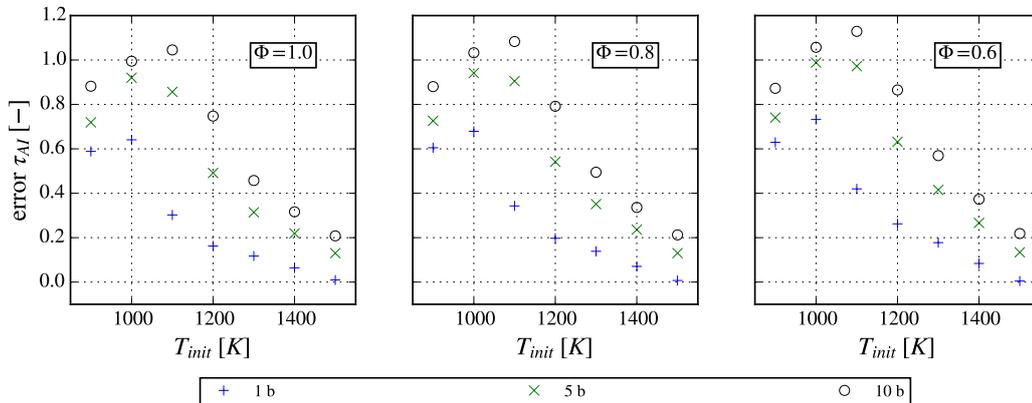


FIGURE B.7 – Erreurs relatives $\text{error } \tau_{AI} = (\tau_{AI} - \tau_{AI}^{ref}) / \tau_{AI}^{ref}$ des délais d'auto-inflammation d'un mélange propane/air du schéma « 24_296_17 » par rapport au schéma référence « LLNL ». Délais d'auto-inflammation basés sur $\max(\dot{\omega}_{OH})$.

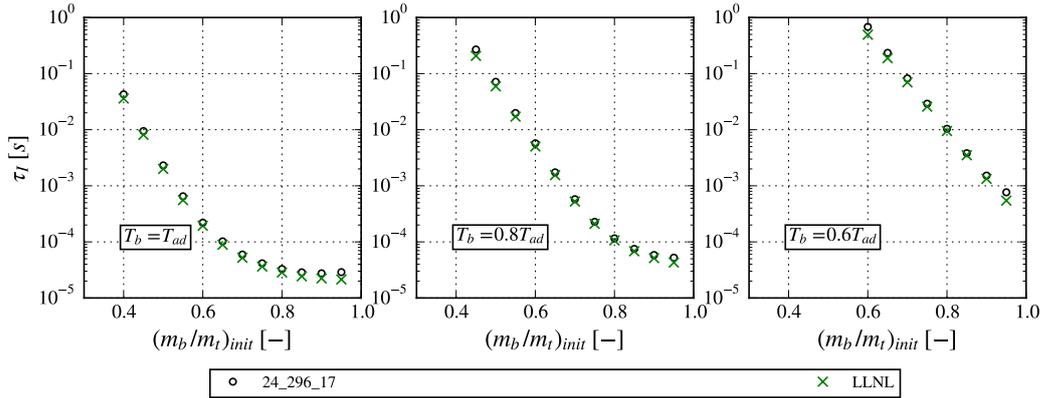


FIGURE B.8 – Délais d’inflammation τ_I basés sur $\max(\dot{\omega}_{OH})$ suite à un mélange de gaz brûlés (composition issue d’une combustion à pression constante d’un mélange propane/air à $P_{init} = 1$ bar, $T_{init} = 300$ K et $\phi = 1.1$) et de gaz frais (propane/air à $P = 1$ bar, $T = 300$ K et $\phi = 0.6$). Simulation de réacteur homogène oD à pression constante par CANTERA [70]. $P = 1$ bar. Propane, schémas « 24_296_17 » et « LLNL ».

CANTERA [70] utilisant les chimies « 24_296_17 » et « LLNL ». Les conditions initiales évoluent selon une compression isentropique des gaz frais à partir de 1 bar 300 K avec $\gamma = 1.4$ et ce afin de représenter les conditions de pression et de température rencontrées en fin compression dans un moteur à pistons.

DÉLAIS D’AUTO-INFLAMMATION FIG. B.6 présente les délais d’auto-inflammation issus de réacteurs oD CANTERA [70] utilisant les chimies « 24_296_17 » et « LLNL » pour :

- 3 conditions de pression : $P = 1, 2$ et 3 bar.
- 3 conditions de richesse : $\phi = 1, 0.8$ et 0.6.
- 7 conditions de température : $T = 900, 1000, 1100, 1200, 1300, 1400$ et 1500 K.

Les délais d’auto-inflammation τ_{AI} sont définis comme le temps pour lequel le taux de production de OH est maximal.

Le schéma ARC « 24_296_17 » produit des délais d’auto-inflammation dans le même ordre de grandeur que son schéma de référence « LLNL » dans la plage de pression, de richesse et de température considérée. FIG. B.7 présente l’erreur relative définie par EQ. 5.4 du schéma « 24_296_17 » par rapport au schéma « LLNL ». L’erreur est relativement élevée en basse température : $\text{error } \tau_{AI} \sim 100\%$ pour les températures inférieures à 1200 K. Néanmoins, elle tend à diminuer pour les hautes températures : $\text{error } \tau_{AI} \sim 20\%$ pour les températures strictement supérieures à 1200 K). Le schéma « 24_296_17 » tend alors à légèrement sur-estimer les délais d’auto-inflammation. Cependant, la tendance de l’évolution de τ_{AI} avec la température initiale, la pression et la richesse du mélange est toujours respectée.

DÉLAIS D’INFLAMMATION À LA SUITE D’UN MÉLANGE DE GAZ FRAIS ET DE GAZ BRÛLÉS FIG. B.8 présente les délais d’inflammation obtenus à la suite d’un mélange de gaz frais et de gaz brûlés utilisant les chimies « 24_296_17 » et « LLNL ». La composition des gaz frais et des gaz brûlés, la pression et la température initiale sont choisies de sorte à reproduire le cas d’étude de Yamaguchi *et al.* [190] dans lequel la préchambre est à $\phi = 1.1$, la chambre principale à $\phi = 0.6$ et les conditions de pression et de température initiales sont de 1 bar et 300 K. Les simulations sont telles que :

- Les gaz frais sont un mélange propane-air à $\phi = 0.6$, $T = 300$ K et $P = 1$ bar.
- Les gaz brûlés sont issus d’une combustion propane/air à pression constante à $\phi = 1.1$, $T_{init} = 300$ K et $P_{init} = 1$ bar.

Les délais d’inflammation τ_I sont définis comme le temps pour lequel le taux de production de OH est maximal.

Le schéma ARC « 24_296_17 » produit des délais d’inflammation en très bon accord avec son schéma de référence « LLNL » sur le cas considéré malgré une légère sur-estimation des délais. L’erreur relative, définie par EQ. 5.5 est de l’ordre de 20 % sur l’ensemble des points considérés.

SYNTHÈSE Malgré les cas canoniques cibles restreints lors du processus de réduction par l'outil YARC, la plage de validité du schéma est relativement large comme le montre [FIG. B.3](#) à [FIG. B.8](#) : les grandeurs d'intérêt étudiées sont en bonne adéquation avec le schéma de référence. Le schéma [ARC « 24_296_17 »](#) peut être utilisé pour simuler les expérimentations de Yamaguchi *et al.* [[190](#)] avec fiabilité.

Quatrième partie

ANNEXE : CONCEPTS THÉORIQUES ET MODÉLISATION DES ÉCOULEMENTS RÉACTIFS PAR LA SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES DE LA TURBULENCE

Cette annexe s'applique à présenter les équations régissant les écoulements fluides réactifs et les modélisations appliquées. Les concepts fondamentaux de la LES sont introduits ainsi que les équations filtrées résultantes.

Note : Les notations d'Einstein sont utilisées sauf indication explicite du contraire. L'indice k fait exception et est utilisé pour faire référence à la $k^{\text{ème}}$ espèce.

 ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES POUR UN MÉLANGE MULTI-ESPÈCES RÉACTIF

Les équations de Navier-Stokes décrivent la conservation de la masse, de la quantité de mouvement et de l'énergie. Si plusieurs espèces sont présentes, une équation de transport pour chaque espèce doit être ajoutée au système. En supposant les forces volumiques ainsi que les sources d'énergies radiatives nulles, le système d'équations de Navier-Stokes pour un écoulement réactif multi-espèces s'écrit :

— Équation de conservation de la masse

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j) = 0 \quad (\text{C.1})$$

— Équation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} (P \delta_{ij} - \tau_{ij}) , \quad \text{pour } i = 1 \text{ à } 3 \quad (\text{C.2})$$

— Équation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho E u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} (u_i (P \delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_j) + \dot{\omega}_T + \dot{Q} \quad (\text{C.3})$$

— Équation de conservation des espèces

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho Y_k u_j}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} J_{j,k} + \dot{\omega}_k , \quad \text{pour } k = 1 \text{ à } n_{spec} \quad (\text{C.4})$$

où u_i représente la $i^{\text{ème}}$ composante de la vitesse, ρ est la masse volumique, P est la pression, τ_{ij} est le tenseur des forces visqueuses, E est l'énergie totale définie comme la somme de l'énergie sensible et de l'énergie cinétique. q_j est le tenseur des flux de chaleur dû à la conduction et à la diffusion des espèces, \dot{Q} est un terme source d'énergie extérieure qui peut être dû à une bougie d'allumage ou un laser par exemple et $\dot{\omega}_T$ est le terme source chimique. Dans l'équation de transport de l'espèce k , Y_k représente la fraction massique de l'espèce en question, $J_{j,k}$ son flux diffusif et $\dot{\omega}_k$ son terme source.

ÉQUATION D'ÉTAT Afin de fermer le système d'équations, une équation d'état liant pression, température et masse volumique est nécessaire. Sous l'hypothèse d'un mélange de gaz parfait, l'équation d'état s'écrit :

$$P = \rho r T \quad (\text{C.5})$$

avec $r = R/\bar{W}$ la constante spécifique des gaz parfaits où $R = 8.3145 \text{ J/mol/K}$ est la constante universelle des gaz parfaits et \bar{W} la masse molaire du mélange.

PROPRIÉTÉS DU MÉLANGE ET DES ESPÈCES Tout écoulement réactif nécessite la présence de plusieurs espèces : des réactifs qui sont consommés pour créer des produits. Pour un mélange de masse

m , contenant n moles et composé de N espèces, la proportion d'une espèce k est décrite par sa fraction massique Y_k ou sa fraction molaire X_k :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} \quad (\text{C.6})$$

$$X_k = \frac{n_k}{n} \quad (\text{C.7})$$

avec n_k le nombre de mole de l'espèce k et m_k la masse de l'espèce k . Par définition $\sum_{k=1}^N Y_k = \sum_{k=1}^N X_k = 1$.

La masse molaire du mélange \bar{W} est définie à partir de sa composition et de la masse molaire de chaque espèce W_k :

$$\frac{1}{\bar{W}} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (\text{C.8})$$

De même les capacités thermiques à pression constante c_p et à volume constant c_v sont déterminées à partir de la composition du mélange :

$$c_p = \sum_{k=1}^N Y_k c_{p,k} \quad (\text{C.9})$$

$$c_v = \sum_{k=1}^N Y_k c_{v,k} \quad (\text{C.10})$$

où $c_{p,k}$ et $c_{v,k}$ sont respectivement les capacités thermiques à pression et à volume constant de l'espèce k .

PROPRIÉTÉS THERMODYNAMIQUES Les énergies et enthalpies des espèces sont définies par rapport à une température de référence T_0 . L'enthalpie massique h_k de l'espèce k est la somme des enthalpies de formation $\Delta h_{f,k}^0$ à la température de référence et de l'enthalpie sensible $h_{s,k}$ entre la température locale et la température de référence :

$$h_k = \underbrace{h_{s,k}}_{\text{sensible}} + \underbrace{\Delta h_{f,k}^0}_{\text{chimique}} \quad (\text{C.11})$$

L'énergie interne de l'espèce k , $e_k = h_k - RT/W_k$ est également composée d'une énergie sensible et d'une contribution chimique à l'état de référence $e_k = e_{s,k} + \Delta h_{f,k}^0$. Dans AVBP, l'état thermodynamique de référence est choisi à $P_0 = 1 \text{ bar}$ et $T_0 = 0 \text{ K}$. Les enthalpies et entropies sensibles sont des grandeurs qui dépendent de la température. Leurs valeurs peuvent être trouvées dans les bases de données JANAF ou NASA par exemple. Dans AVBP, ces grandeurs sont tabulées tous les 100 K. Finalement les enthalpies et entropies sensibles de l'espèce k sont définies comme suit :

$$h_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0\text{K}}^{T_i} C_{p,k} dT = \frac{h_{s,k}^m(T_i) - h_{s,k}^m(T_0)}{W_k} \quad (\text{C.12})$$

$$s_k(T_i) = \frac{s_k^m(T_i) - s_k^m(T_0)}{W_k} \quad (\text{C.13})$$

L'exposant m renvoie à des valeurs molaires. L'énergie sensible de l'espèce k est obtenue à partir de l'expression suivante :

$$e_{s,k}(T_i) = \int_{T_0=0\text{K}}^{T_i} C_{v,k} dT = h_{s,k}(T_i) - r_k T_i \quad (\text{C.14})$$

Les capacités thermiques à pression constante $C_{p,k}$ et à volumes constant $C_{v,k}$ pour chaque espèce k sont respectivement définies comme les dérivées de l'enthalpie sensible et de l'énergie sensible. Finalement l'énergie sensible et l'enthalpie sensible du mélange sont définies à partir des expressions suivantes :

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \quad (\text{C.15})$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^N \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_{s,k} \quad (\text{C.16})$$

CONTRAINTES VISQUEUSES Pour un fluide Newtonien et à l'aide de l'hypothèse de Stokes, le tenseur des forces visqueuses τ_{ij} s'exprime en fonction du tenseur des contraintes S_{ij} :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} S_{kk} \delta_{ij} \right) \quad (\text{C.17})$$

avec :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (\text{C.18})$$

Dans cette expression, μ désigne la viscosité dynamique du fluide.

FLUX DIFFUSIF DES ESPÈCES La valeur exacte de la vitesse de diffusion inter-espèces est une grandeur complexe à calculer pour un mélange contenant plus de deux espèces : elle nécessite l'inversion d'un système de taille N^2 dans chaque direction de l'espace et à chaque instant [54]. Afin d'obtenir une estimation moins coûteuse de ce flux diffusif, l'approximation de [85] est couramment utilisée. Dans ce cas la vitesse de diffusion $D_{k,j}$ de l'espèce k dans l'espèce j est supposée égale pour toutes espèces ($D_{k,j} = D_k$). Cette hypothèse ne garantit cependant pas la conservation de la masse. Afin d'assurer cette conservation, une vitesse de correction V_c est ajoutée au flux diffusif :

$$J_{i,k} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \quad (\text{C.19})$$

avec :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (\text{C.20})$$

FLUX DE CHALEUR Pour un écoulement multi-espèces, le flux de chaleur comprend deux termes : le premier qui rend compte de la conduction de la chaleur et un second qui décrit la diffusion de la chaleur par l'intermédiaire de la diffusion des espèces :

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} - \underbrace{\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{\bar{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{Diffusion thermique par diffusion d'espèces}} \quad (\text{C.21})$$

Dans cette expression $h_{s,k}$ représente l'enthalpie sensible de l'espèce k .

TERMES SOURCES CHIMIQUES Dès lors qu'une énergie suffisante est fournie au mélange pour atteindre l'énergie d'activation, les réactifs sont consommés pour créer les produits. Pour un mécanisme cinétique de M réactions entre N espèces \mathcal{M}_k :



Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est la somme des taux de réactions $\dot{\omega}_{kj}$ produits par les M réactions :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (\text{C.23})$$

avec $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$ et \mathcal{Q}_j le taux d'avancement de la réaction j qui s'écrit :

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (\text{C.24})$$

$K_{f,j}$ and $K_{r,j}$ sont les constantes de la réaction j dans le sens direct et indirect.

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T}\right) \quad (\text{C.25})$$

$A_{f,j}$ and $E_{a,j}$ représentent respectivement la constante pré-exponentielle et l'énergie d'activation de la réaction j . Le taux d'avancement dans le sens indirect est obtenu à partir de la relation de [102] :

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (\text{C.26})$$

La constante d'équilibre K_{eq} est définie par une expression d'Arrhénius :

$$K_{eq} = \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T} \right) \quad (\text{C.27})$$

avec $p_0 = 1$ bar. ΔH_j^0 et ΔS_j^0 sont respectivement les variations d'enthalpie totale (sensible et chimique) et d'entropie de la réaction j :

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (\text{C.28})$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} W_k s_k(T) \quad (\text{C.29})$$

$\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie massique de formation de l'espèce k à la température $T_0 = 0\text{K}$. Finalement le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ de l'équation de conservation de l'énergie est défini par :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (\text{C.30})$$

PROPRIÉTÉS DE TRANSPORT Dans la majorité des codes de mécanique des fluides numériques, la viscosité est supposée indépendante de la composition du mélange et égale à la viscosité de l'air qui dépend néanmoins de la température. La loi de Sutherland peut être utilisée :

$$\mu = c_1 \frac{T^{3/2}}{T + c_2} \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{3/2}} \quad (\text{C.31})$$

Une loi en puissance peut également être utilisée :

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^{b_2} \quad (\text{C.32})$$

avec b_2 une constante comprise entre 0.5 et 1.0.

Le calcul des coefficients de diffusion des espèces est complexe. Pour des raisons de coûts de calcul, le code AVBP n'utilise pas les coefficients de diffusion moléculaire D_k exacts, déterminés à partir de la théorie de la cinétique des gaz comme l'intégrale des collisions inter-moléculaires. Ces coefficients peuvent être exprimés selon une fonction des coefficients D_{ij} obtenus de la théorie de la cinétique des gaz (Hirschfelder *et al.* [85]). Selon Bird *et al.* [14], le coefficient de diffusion de l'espèce k dans le mélange peut s'exprimer selon

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k} X_j / D_{jk}} \quad (\text{C.33})$$

Afin de réduire les couts de calcul, une approche simplifiée est utilisée dans AVBP pour le calcul des D_k . Une expression de la diffusion moléculaire est obtenue en supposant des nombres de Schmidt Sc_k constants pour chaque espèce :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (\text{C.34})$$

Le coefficient de conductivité thermique λ est quant à lui défini à partir du nombre de Prandtl Pr , également supposé constant dans le code de calcul AVBP :

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad (\text{C.35})$$

La diffusion thermique D_{th} du mélange est estimée à l'aide du rapport entre la conduction thermique et la capacité thermique à pression constante :

$$D_{th} = \frac{\lambda}{\rho C_p} \quad (\text{C.36})$$

Il est possible d'introduire le nombre de Lewis qui compare la diffusion thermique à la diffusion moléculaire de chaque espèce :

$$Le_k = \frac{D_{th}}{D_k} \quad (\text{C.37})$$

MÉTHODES DE RÉOLUTION DES ÉQUATIONS DE NAVIER-STOKES

Big whorls have little whorls, which feed on their velocity, And little whorls have lesser whorls, and so on to viscosity - Lewis Richardson

EQ. C.1 - EQ. C.4 sont exactes mais il n'est généralement pas possible de trouver une solution analytique, excepté dans certains cas très simplifiés. Dans les années 1920, Lewis Fry Richardson est connu comme un des premiers mathématiciens à développer des méthodes numériques pour résoudre ces équations sous forme discrète. La grande difficulté de ces méthodes est la large gamme d'échelles présente dans les écoulements turbulents à résoudre : depuis l'échelle intégrale l_t qui représente les plus grands tourbillons jusqu'à l'échelle de Kolmogorov η_k qui représente les plus petits tourbillons de l'écoulement. L'échelle intégrale est typiquement de l'ordre de la taille caractéristique de la géométrie à étudier. Les plus grandes structures de l'écoulement sont anisotropiques et contiennent la plus grande partie de l'énergie. Cette énergie est transférée depuis l'échelle intégrale vers l'échelle de Kolmogorov par interaction entre les échelles et rupture des plus gros tourbillons en plus petites structures. Les structures les plus petites de l'écoulement ont un comportement isotrope de dissipation de l'énergie. La théorie de [100] permet d'estimer le ratio d'échelles de l'écoulement :

$$\frac{l_t}{\eta} = Re_t^{3/4} = \left(\frac{\rho u' l_t}{\mu} \right)^{3/4} \quad (D.1)$$

avec Re_t le nombre de Reynolds turbulent basé sur la vitesse fluctuante u' et l'échelle intégrale l_t . Pour une résolution complète de l'intégralité des structures présentes dans l'écoulement, la discrétisation doit être de l'ordre du rapport d'échelles l_t/η . Par conséquent, le nombre de points de discrétisation nécessaire à la résolution d'un écoulement turbulent tri-dimensionnel peut être estimé par :

$$N_{pt} \simeq \left(Re_t^{3/4} \right)^3 = Re_t^{9/4} \quad (D.2)$$

Par exemple, pour simuler l'écoulement autour d'un véhicule de 4m se déplaçant à 100 km/h (soit environ 30 m/s) et sachant que pour ce genre d'écoulement l'intensité de turbulence est de l'ordre de 10% soit une vitesse fluctuante $u' \sim 3$ m/s :

$$Re_t = \frac{\rho u'_{car} L_{car}}{\mu} = \frac{1.2 * 3 * 4}{1.8 \cdot 10^{-5}} \simeq 8 \cdot 10^5 \quad (D.3)$$

A l'aide de **EQ. D.2**, le nombre de points nécessaire à une telle simulation peut être estimé à $N_{pt} = 2.10^{13}$, ce qui est environ 4 à 5 ordres de grandeur au dessus des plus gros calculs aujourd'hui réalisables. Cette estimation représente la résolution d'une simulation complète de l'écoulement, aussi appelée **DNS** (pour *Direct Numerical Simulation* en anglais), ce qui est la méthode de simulation numérique la plus coûteuse. Heureusement, différentes approches existent pour décrire un écoulement en CFD qui ne nécessitent pas toutes une discrétisation complètes de toutes les échelles turbulentes :

- les simulations **RANS** sont les simulations les moins coûteuses qui ont permis la généralisation de la **CFD**, notamment au niveau industriel. Avec les méthodes **RANS**, les structures de la turbulence ne sont pas résolues mais modélisées. Cette approche donne accès à une réalisation moyenne et à l'intensité des fluctuations autour de cette moyenne. Les équations du **RANS** sont obtenues en moyennant les équations de Navier-Stokes. De nombreux modèles sont nécessaires pour représenter les fluctuations présentes à toutes les échelles de l'écoulement.

- entre l'approche **DNS** et l'approche **RANS**, se trouve la simulation aux grandes échelles (**LES** pour *Large Eddy Simulation* en anglais). Cette approche repose sur une coupure entre les grandes échelles qui contiennent l'essentiel de l'énergie de l'écoulement et dont la dynamique dépend de la géométrie étudiée et les plus petites échelles qui dissipent l'énergie. L'objectif de la **LES** est de ne résoudre que les plus grandes échelles et de modéliser le comportement des plus petites en séparant les échelles à l'aide d'un filtrage spatial. Les équations **LES** sont obtenues par un filtrage des équations de Navier-Stokes. A l'inverse du **RANS** qui ne renseigne que sur une réalisation moyenne ou un cycle moyen dans le cas de simulation de moteurs à piston, la simulation **LES** reproduit chaque réalisation.

FIG. D.1 présente une illustration typique de l'évolution temporelle d'une sonde de température obtenue en **RANS**, **DNS** ou **LES** pour une flamme turbulente.

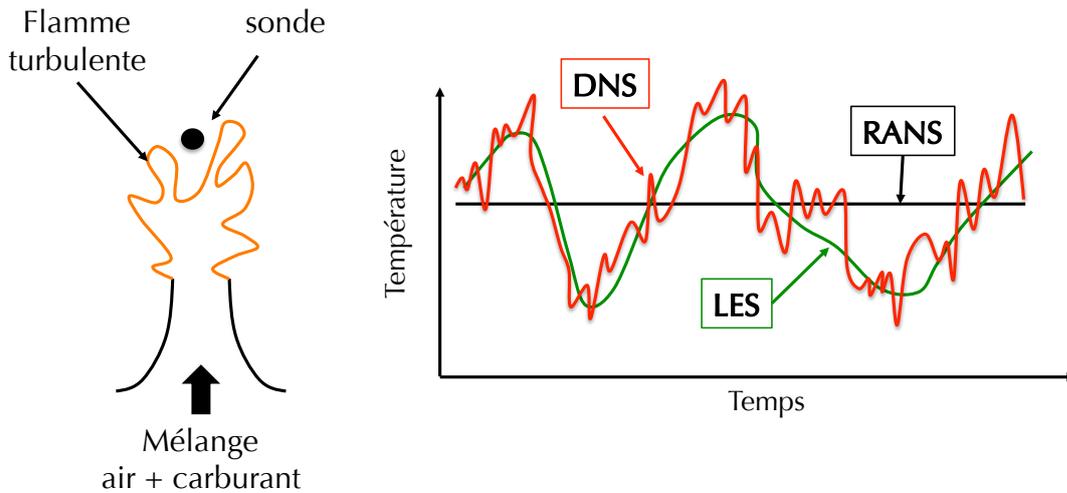


FIGURE D.1 – Schématisation de l'évolution temporelle d'une grandeur obtenue par **RANS**, **LES** et **DNS** [148]. Le **RANS** ne capture qu'une température moyenne vue par la sonde, la **LES** permet quant à elle de retrouver les fluctuations basses fréquences de la température et la **DNS** résout directement toutes les fluctuations vues par la sonde.

Une autre représentation de ces trois approches dans le domaine fréquentiel est proposée **FIG. D.2**. Dans le cas du **RANS**, toutes les échelles du spectre sont modélisées. A l'inverse la **DNS** résout toutes les échelles de l'écoulement, aucune modélisation n'est nécessaire. Avec la **LES**, les échelles les plus énergétiques sont résolues tandis que les échelles plus petites que l'échelle de coupure imposée par le filtre sont modélisées. La représentation des différentes modélisations dans l'espace fréquentiel proposée **FIG. D.2** met en avant une caractéristique essentielle de la **LES** qui est sa convergence naturelle vers la **DNS** lorsque la taille du filtre tend vers l'échelle de Kolmogorov.

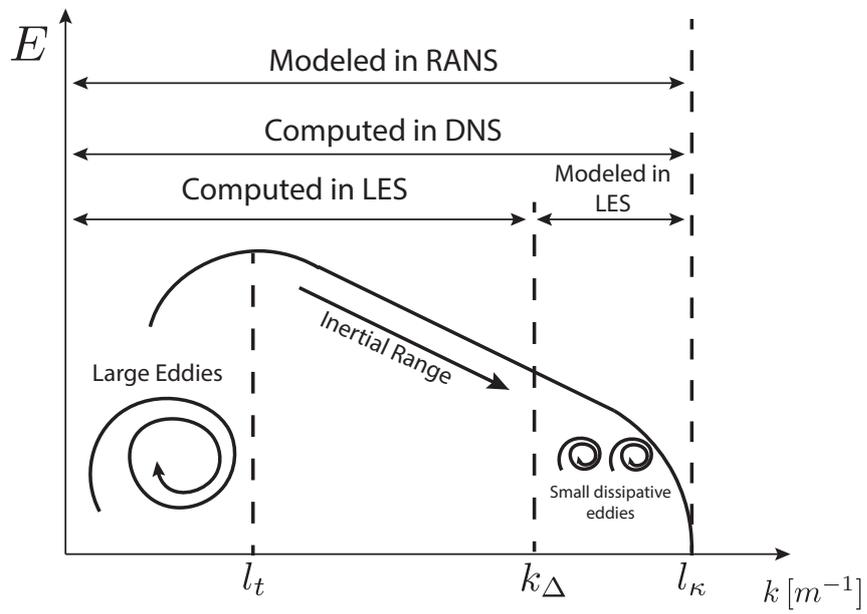


FIGURE D.2 – Spectre d'énergie turbulente en fonction du nombre d'onde pour un écoulement turbulent. k_Δ est l'échelle de coupure du filtre LES .

SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES DE LA TURBULENCE

La simulation aux grandes échelles se positionne comme une approche intermédiaire entre le [RANS](#), aujourd’hui largement utilisé et la [DNS](#) riche d’information mais au coup de calcul très élevé. Comme expliqué précédemment, les équations [RANS](#) sont obtenues en moyennant les équations de Navier-Stokes. Cette méthode ne donne accès qu’aux grandeurs moyennes de l’écoulement et nécessite de modéliser la turbulence. Les modèles utilisés ont donc un grand impact sur le résultat du calcul. L’avantage de la [LES](#) est de réduire l’importance de ces modèles grâce à un filtrage de la turbulence : les échelles plus grandes que la taille du filtre sont directement résolues tandis que les structures de taille inférieure à l’échelle du filtre sont modélisées. En pratique, dans la majorité des codes de calcul, le maillage joue le rôle de filtre implicite. On parle alors de modèles de sous maille ([SGS](#) pour *Sub-Grid Scale* en anglais) pour désigner la partie modélisée en [LES](#). Comme illustré [FIG. D.2](#), les structures les plus grosses portent l’essentiel de l’énergie de l’écoulement. Si la taille de filtre est appropriée, la [LES](#) est capable de résoudre les structures énergétiques et ne modélise que les structures contenant peu d’énergie dont le comportement est générique.

E.1 EQUATIONS POUR LA SGE NON RÉACTIVE

Les équations de la [LES](#) sont obtenues par un filtrage des équations de Navier-Stokes dont le rôle est de séparer les échelles de la turbulence. L’opération de filtrage fait apparaître des termes non résolus qui nécessitent une modélisation. En se basant sur le manuel AVBP [27], ce chapitre présente les équations de Navier-Stokes filtrées ainsi que les modèles utilisés dans les travaux qui alimentent ce document.

E.1.1 OPÉRATION DE FILTRAGE

Les équations LES filtrées à l’échelle Δ sont obtenues par la convolution de [EQ. C.1](#) à [EQ. C.4](#) avec un filtre passe bas G_Δ . Pour une grandeur f , l’opération de filtrage s’écrit :

$$\bar{f}(x) = \int f(x') G_\Delta(x - x') dx' \quad (\text{E.1})$$

Les quantités filtrées \bar{f} représentent l’influence des grandes structures de l’écoulement (résolues par la LES) alors que l’influence des structures plus petites que la taille de filtre Δ sont représentées comme la différence entre le champ réel f et le champ filtré \bar{f} : $f' = f - \bar{f}$. L’opération de filtrage LES diffère de l’opération de moyenne en [RANS](#), en particulier :

- le filtrage des fluctuations de sous maille n’aboutit pas à un champ nul : $\overline{f'} \neq 0$
- le filtrage d’une grandeur filtrée n’est pas égal à la grandeur filtrée : $\overline{\bar{f}} \neq \bar{f}$

Pour un écoulement à densité variable, la moyenne de Favre est utilisée :

$$\bar{\rho f}(x) = \int \rho f(x') G_\Delta(x - x') dx' = \overline{\rho f} \quad (\text{E.2})$$

E.1.2 EQUATIONS DE NAVIER-STOKES FILTRÉES

En l'absence de forces volumiques externes, l'application d'un filtrage de Favre aux équations de Navier-Stokes instantanées s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0 \quad (\text{E.3})$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{u_i \tilde{u}_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j] - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} \quad (\text{E.4})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{E}) = & - \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\overline{u_i E} - \tilde{u}_i \tilde{E})] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) \\ & - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\overline{\sum_{k=1}^N h_{s,k} J_{i,k}} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i (p \delta_{ij} - \tau_{ij})}) + \bar{Q} + \bar{\omega}_T \end{aligned} \quad (\text{E.5})$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k) = - \frac{\partial}{\partial x_i} [\bar{\rho} (\overline{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)] - \frac{\partial \bar{J}_{j,k}}{\partial x_i} + \bar{\omega}_k \quad (\text{E.6})$$

Certains termes présents dans le jeu d'équations précédent ne sont pas calculables directement en LES et nécessitent une fermeture. En particulier, les flux laminares sont approchés à l'aides des grandeurs résolues et les termes de sous maille sont modélisés.

APPROXIMATION DES FLUX LAMINAIRES Les termes de flux laminares d'espèces et d'enthalpie sont généralement faibles devant les flux turbulents et peuvent soit être négligés soit être exprimés de façon simple à partir des gradients résolus :

$$\bar{J}_{i,k} \simeq -\bar{\rho} \left(\overline{D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i}} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \quad (\text{E.7})$$

$$\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \simeq \bar{\lambda} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \quad (\text{E.8})$$

$$\overline{\sum_{k=1}^N h_{s,k} J_{i,k}} \simeq \sum_{k=1}^N \overline{h_{s,k} \tilde{J}_{i,k}} \quad (\text{E.9})$$

avec $\tilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^N \overline{D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i}}$. Pour un fluide Newtonien, le tenseur des contraintes laminares $\bar{\tau}_{ij}$ est approximé à partir des quantités filtrées :

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\mu \left(\overline{S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{kk}} \right) \simeq 2\bar{\mu} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) \quad (\text{E.10})$$

$$\text{avec } \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (\text{E.11})$$

Les propriétés des transport sont également estimées à partir des grandeurs résolues :

$$\bar{\mu} \simeq \mu(\bar{T}), \bar{D}_k \simeq \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} Sc_k} \text{ et } \bar{\lambda} \simeq \frac{\bar{\mu} \bar{C}_p(\bar{T})}{Pr}$$

De façon similaire, le flux laminaire d'énergie peut exprimé comme :

$$\bar{q}_i = -\lambda \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{n_{spec}} \overline{\tilde{J}_{ik} h_{sk}} \simeq -\bar{\lambda} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{n_{spec}} \bar{J}_{ik} \tilde{h}_{sk} \quad (\text{E.12})$$

avec with $\bar{\lambda} \simeq \frac{\bar{\mu} \bar{C}_p(\bar{T})}{Pr}$.

E.1.3 MODELISATION DES TERMES DE SOUS MAILLE

TENSEUR DE REYNOLDS DE SOUS MAILLE $\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}$ Le tenseur de Reynolds de sous maille est classiquement modélisé suivant l'hypothèse de viscosité turbulente proposée par Boussinesq [84, 170] :

$$\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j} = -\mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u_j}}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \widetilde{u_k}}{\partial x_k} \right) \quad (\text{E.13})$$

l'hypothèse de Boussinesq modélise l'aspect dissipatif de la turbulence de sous maille. Différents modèles sont disponibles pour déterminer la valeur de la viscosité turbulente μ_t (SECTION E.1.4).

FLUX TURBULENT DES ESPÈCES $\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k}$ ET DE L'ÉNERGIE $\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E}$ Ces termes sont modélisés à partir des gradients résolus :

$$\bar{\rho} \left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k} \right) = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} V_i^{c,t} \right) \quad (\text{E.14})$$

$$\rho \left(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E} \right) = -\lambda^t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \widetilde{h_{s,k}} \overline{J_{i,k}^t} \quad (\text{E.15})$$

La vitesse de correction des flux moléculaires turbulents s'écrit :

$$\widetilde{V}_i^{c,t} = \sum_k D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} \quad (\text{E.16})$$

Les coefficients de transport turbulents sont estimés de manière analogue aux coefficients de transport résolus :

$$D_k^t = \frac{\mu_t}{\bar{\rho} Sc_k^t} \quad (\text{E.17})$$

$$\lambda^t = \frac{\mu^t \overline{C_p}}{Pr^t} \quad (\text{E.18})$$

avec Sc_k^t le nombre de Schmidt turbulent de l'espèce k et Pr^t le nombre de Prandtl turbulent.

E.1.4 MODÈLES DE VISCOSITÉ TURBULENTE

Les modèles de sous maille pour le tenseur de Reynolds classiquement utilisés en LES supposent un comportement des structures de sous maille purement dissipatif. Avec cette hypothèse, la turbulence de sous maille est modélisée par une viscosité turbulente ν_t . Le modèle le plus couramment utilisé en LES est une adaptation du modèle de [166] développé en RANS. Par la suite, des évolutions ont été proposées pour améliorer le comportement de ce modèle. Ne sont présentés dans ce chapitre que les modèles utilisés dans les travaux qui alimentent ce document.

LE MODÈLE DE SMAGORINSKY La viscosité turbulente est exprimée selon :

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij}} \quad (\text{E.19})$$

où Δ représente la taille caractéristique du maillage (estimé comme la racine cubique du volume de la cellule) et C_S est une constante du modèle. [9] montre que pour une Turbulence Homogène Isotrope (Turbulence Homogène Isotrope (THI)), si l'échelle de coupure LES est située dans la zone inertielle (région du spectre où la décroissance de l'énergie suit une pente $-5/3$ en échelle logarithmique), la constante du modèle vaut $C_S = 0.18$. Cependant cette valeur n'est vraie que pour une THI, par exemple pour un canal turbulent [40] obtient une valeur de $C_S = 0.1$. Le modèle de Smagorinsky est le

modèle le plus largement utilisé et validé pour de multiples configurations. Cette fermeture possède un bon comportement dans des zones de turbulence homogène isotrope mais en pratique, il est souvent nécessaire d'adapter la constante au cas étudié. Ce modèle simple surestime la dissipation dans les zones de pure rotation ou translation ainsi que dans les zones de transition [159]. Il ne permet pas non plus d'obtenir le bon comportement de la viscosité en proche paroi.

MODÈLE DYNAMIQUE DE GERMANO Pour s'affranchir du choix arbitraire de la constante du modèle de Smagorinsky, [68] introduisent une méthode dynamique pour l'évaluation de la constante grâce à un second filtrage des équations de Navier-Stokes. La détermination de cette constante suit la procédure de [113] :

$$C_{S_D}^2 = \frac{1}{2} \frac{M_{ij}M_{ij}}{L_{ij}L_{ij}} \quad (\text{E.20})$$

Les tenseur M_{ij} et L_{ij} introduisent la notion d'un second filtre de taille $\hat{\Delta}$:

$$M_{ij} = \hat{\Delta}^2 \sqrt{2} \langle \tilde{S}_{ij} \rangle \langle \tilde{S}_{ij} \rangle \langle \tilde{S}_{ij} \rangle \quad (\text{E.21})$$

$$L_{ij} = \langle \tilde{u}_i \rangle \langle \tilde{u}_j \rangle - \langle \tilde{u}_i \tilde{u}_j \rangle \quad (\text{E.22})$$

LE MODÈLE SIGMA Dans le modèle SIGMA proposé par [12], la viscosité turbulente de sous-maille s'écrit sous la forme :

$$\nu_t = C_\sigma^2 \Delta^2 D_\sigma \quad (\text{E.23})$$

Le terme D_σ s'exprime à partir du tenseur de Reynolds :

$$D_\sigma = \frac{\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2} \quad (\text{E.24})$$

où σ_i représente la $i^{\text{ème}}$ valeur propre du tenseur de Reynolds. L'opérateur D_σ est construit pour obtenir naturellement une décroissance de la turbulence de sous-maille dans certaines conditions : (i) la combinaison des valeur propres $\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)$ assure une décroissance de la viscosité turbulente en fonction de la distance à la paroi au cube, (ii) dans le cas de mouvement de pure rotation ou d'écoulement bi-dimensionnels la viscosité s'annule ($\sigma_3 = 0$), (iii) dans le cas d'expansion ou de compression isentropique ($\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$) le modèle ne prédit aucune viscosité turbulente.

LE MODÈLE WALE Dans le modèle WALE proposé par [46], la viscosité turbulente s'écrit :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (\text{E.25})$$

avec

$$s_{ij}^d = \frac{1}{2} (\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3} \tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (\text{E.26})$$

où $C_w = 0.4929$ est la constante du modèle et \tilde{g}_{ij} est le gradient de vitesse résolu. Ce modèle est écrit de façon à assurer un comportement asymptotique correct proche paroi.

Un résumé des propriétés des différents modèles peut être trouvé [TAB. E.1](#). Dans ce travail, le modèle de Smagorinsky à constante dynamique est utilisé pour les calculs 2D. Pour les calculs 3D, le modèle SIGMA est préféré : il possède un comportement asymptotique adéquat proche paroi et n'induit pas de la viscosité SGS lors de rotation solide. Cette dernière propriété est très importante pour les écoulements swirlés qui comportent de larges structures en rotation. De plus, le modèle WALE n'implique pas de viscosité SGS lors d'expansion axisymétrique : c'est une propriété intéressante pour la modélisation de flamme sous forme de jet axisymétrique.

	Smagorinsky	WALE	SIGMA
Comportement asymptotique proche paroi adéquat	Non	Oui	Oui
Pas de viscosité <i>SGS</i> lors de rotation solide	Oui	Non	Oui
Pas de viscosité <i>SGS</i> lors de cisaillement pur	Non	Oui	Oui
Pas de viscosité <i>SGS</i> lors d'expansion axisymétrique	Non	Non	Oui
Pas de viscosité <i>SGS</i> lors d'expansion isotrope	Non	Oui	Oui

TABLE E.1 – Comparaison des propriétés des différents modèles de sous maille. Adapté de [130].

 CONCEPTS THÉORIQUES EN COMBUSTION

L'objectif de ce chapitre est d'introduire quelques aspects théoriques de combustion turbulente. Premièrement, des aspects généraux de combustion prémélangée et non prémélangée sont présentés. Ensuite, les descriptions de la chimie les plus communes sont présentées et comparées. Enfin, quelques approches afin de résoudre l'interaction chimie-turbulence au niveau SGS sont décrites.

F.1 COMBUSTION PRÉ MÉLANGÉE

F.1.1 FLAMME LAMINAIRE PRÉMÉLANGÉE

La flamme laminaire prémélangée est un cas canonique fondamental pour comprendre le processus de combustion. L'oxydant et le carburant sont parfaitement mélangés avant la combustion du mélange. La flamme correspond alors à une région réactive où un fort gradient de température est présent. L'épaisseur est de l'ordre de quelques centaines de micromètre à pression atmosphérique.

STRUCTURE DE LA FLAMME La flamme peut être décomposée en 3 zones [142] (FIG. F.1) :

- une zone préchauffée *preheat zone* qui est chimiquement inerte (dans cette région, les gaz frais sont préchauffés par les gaz chauds);
- une zone de réaction *inner reaction layer* d'épaisseur δ_r où le carburant se décompose en espèces intermédiaires pour réagir avec l'oxydant;
- une zone post-flamme *post-flame zone*, où les espèces intermédiaires sont converties en produits et où des réactions d'oxydations lentes ont lieu.

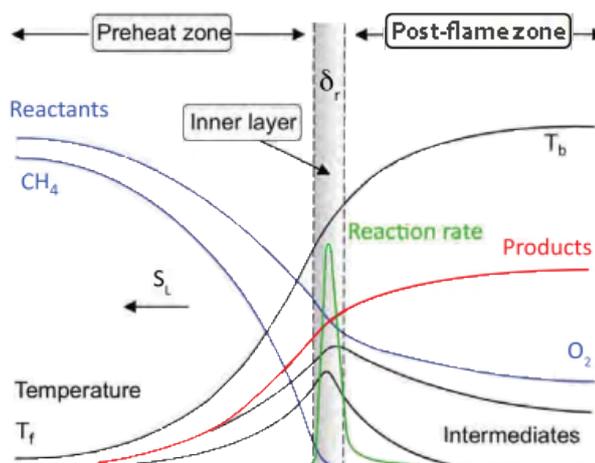


FIGURE F.1 – Schéma d'une flamme 1D prémélangée.

ÉQUATIONS Dans le référentiel de la flamme, si cette dernière est stationnaire, les équations bilans s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} = 0 \text{ ou de façon équivalente } \rho u = cst = \rho_f S_l, \quad (\text{F.1})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} (\rho(u + V_k)Y_k) = \dot{\omega}_k = \rho \dot{\omega}_{Y_k}, \quad (\text{F.2})$$

$$\rho C_p u \frac{\partial T}{\partial x} = \dot{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) - \frac{\partial T}{\partial x} \left(\rho \sum_{k=1}^{n_{spec}} C_{p,k} Y_k V_k \right). \quad (\text{F.3})$$

VARIABLES DE CONTRÔLE POUR UNE FLAMME PRÉMÉLANGÉE : RATIO D'ÉQUIVALENCE ET VARIABLE DE PROGRÈS Les conditions initiales d'une flamme prémélangée sont contrôlées par la pression, la température et la composition des gaz frais. La composition est caractérisée par le ratio d'équivalence (ou la richesse) ϕ , qui est défini comme

$$\phi = s \frac{Y_F}{Y_O} = \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right) / \left(\frac{Y_F}{Y_O} \right)_{st}, \quad (\text{F.4})$$

où Y_F and Y_O sont respectivement la fraction massique de carburant et d'oxydant du côté des gaz frais. s est le rapport massique à la stœchiométrie

$$s = \left(\frac{Y_O}{Y_F} \right)_{st} = \frac{v'_O W_O}{v'_F W_F}. \quad (\text{F.5})$$

où v'_O et v'_F sont les coefficients stœchiométrique de l'oxydant et du carburant issu de la réaction globale. Au conditions stœchiométriques ($\phi = 1.0$), le carburant et l'oxydant sont complètement convertis en produits de combustion. Lorsque $\phi < 1$, le mélange est pauvre ce qui correspond à un excès d'oxydant. A l'inverse, lorsque $\phi > 1$ le mélange est riche et l'oxydant devient le réactif limitant. De façon alternative, la composition peut être décrite par la fraction de mélange Z qui est introduite [SECTION F.2.1](#).

Une variable de progrès c quantifie l'évolution du mélange des gaz frais ($c = 0$) au gaz brûlés ($c = 1$). Cette variable peut être basée sur la température

$$c = \frac{T - T_u}{T_b - T_u} \quad (\text{F.6})$$

où les indices $_u$ and $_b$ correspondent respectivement aux gaz frais et aux gaz brûlés. Cette variable peut également être basée sur les produits de combustion majoritaires

$$c = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}}, \quad (\text{F.7})$$

où $Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H_2O}$ et l'indice eq représente la valeur à l'équilibre. Sous l'hypothèse de Lewis unitaire, une équation bilan pour la variable de progrès peut être écrite comme

$$\frac{\partial \rho u c}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \dot{\omega}_c. \quad (\text{F.8})$$

La variable de progrès c est utile afin d'analyser la structure de la flamme. C'est particulièrement le cas lors de comparaisons entre flammes laminaires et turbulentes : les comparaisons dans l'espace de c sont plus simples. c peut également être définie afin de localiser le front de flamme et pour définir la normale au front de flamme

$$\mathbf{n} = - \frac{\nabla c}{|\nabla c|}. \quad (\text{F.9})$$

PROPRIÉTÉS INTRINSÈQUES : VITESSE DE CONSOMMATION ET ÉPAISSEUR DE FLAMME En prémélange, la flamme possède une vitesse caractéristique qui est sa vitesse de consommation. Cette

vitesse est appelée vitesse de flamme laminaire S_L^0 et dépend de la composition et de la température des gaz frais ainsi que de la pression. Pour une chimie à une étape, il peut être démontré [187] que la vitesse de flamme laminaire est liée à la diffusivité thermique $D_{th} = \lambda/(\rho C_p)$ et à la constante pré exponentielle d'Arrhenius A :

$$S_L \propto \sqrt{D_{th} A}. \quad (\text{F.10})$$

La vitesse de flamme laminaire est comprise entre $S_L^0 = 0.1 - 2$ m/s pour des hydrocarbures classiques. La flamme laminaire est caractérisée par une épaisseur thermique :

$$\delta_T = \frac{T_b - T_u}{\max \left(\left| \frac{\partial T}{\partial x} \right| \right)}. \quad (\text{F.11})$$

L'épaisseur de flamme est liée à la diffusivité thermique et à la vitesse de flamme laminaire par :

$$\delta_l \propto \frac{D_{th}}{S_L} \propto \sqrt{\frac{D_{th}}{A}}. \quad (\text{F.12})$$

La flamme peut également être caractérisée par une épaisseur de la zone de réaction δ_r [107] qui est plus petite que l'épaisseur thermique δ_T .

DIFFÉRENTES VITESSES DE FLAMMES Plusieurs vitesses de flamme peuvent être définies afin d'analyser la cinématique de la propagation de flammes prémélangées. La vitesse absolue de la flamme dans le référentiel \mathbf{w} peut être décomposée selon (FIG. F.2) :

- la vitesse absolue $S_a = \mathbf{w} \cdot \mathbf{n}$, qui est la vitesse absolue du front de flamme dans le référentiel du laboratoire ;
- la vitesse de déplacement $S_d = (\mathbf{w} - \mathbf{u}) \cdot \mathbf{n} = S_a - \mathbf{u} \cdot \mathbf{n}$, qui est la vitesse relative du front de flamme par rapport à la vitesse locale de l'écoulement u ;
- la vitesse de consommation S_c est la vitesse à laquelle les réactifs sont consommés et est égale à l'intégrale du taux de réaction du carburant dans la direction normale au front de flamme

$$S_c = - \frac{1}{\rho_f (Y_F^f - Y_F^b)} \int_{-\infty}^{\infty} \dot{\omega}_F \mathbf{dn}. \quad (\text{F.13})$$

Pour une flamme laminaire prémélangée stationnaire

$$S_a = 0, \quad (\text{F.14})$$

$$S_l = S_c = S_d^* = \frac{\rho}{\rho_f} S_d, \quad (\text{F.15})$$

$$(\text{F.16})$$

où S_d^* est une vitesse de déplacement pondérée par la densité [88] introduit afin de tenir compte de la dilatation de l'écoulement. Pour des cas plus complexes, ces quantités peuvent beaucoup varier sous l'effet de la turbulence, de phénomènes instationnaires, de courbatures ou d'étirements.

F.1.2 EFFETS D'ÉTIREMENTS ET DE COURBURES

L'étirement de la flamme κ est définie comme l'évolution temporelle d'un élément de surface de flamme [187]

$$\kappa = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt}. \quad (\text{F.17})$$

Selon [26] l'étirement peut être écrit

$$\kappa = \underbrace{(\delta_{ij} - n_i n_j) \frac{\partial u_i}{\partial x_j}}_{\text{étirement tangentiel}} + \underbrace{S_d \frac{\partial n_i}{\partial x_i}}_{\text{effet de courbure}} = a_t + 2S_d \mathcal{K}, \quad (\text{F.18})$$

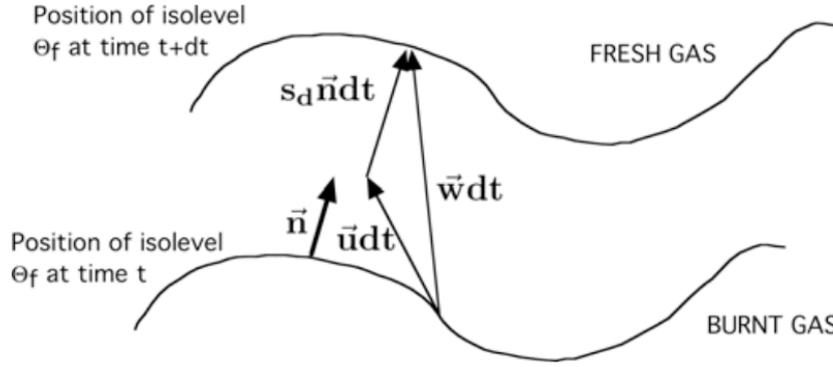


FIGURE F.2 – Flame speed definitions. From [148].

où S_d est la vitesse de déplacement, a_t est l'étirement tangentiel, \mathbf{n} est le vecteur normal à la flamme et

$$\mathcal{K} = \frac{1}{2} \nabla \cdot \mathbf{n} \quad (\text{F.19})$$

est la courbature du front de flamme. Le premier terme qui contribue à κ dans [EQ. F.18](#) est le taux d'étirement qui est lié aux non uniformités de l'écoulement. Le second terme est lié à la courbature du front de flamme [148].

IMPACT DE L'ÉTIREMENT SUR LA FLAMME Sous quelques hypothèses (faible étirement, chimie une étape, ...), la structure de flamme est contrôlée par κ [23, 21, 30]. Cela correspond à un régime linéaire dans lequel S_d et S_c sont linéairement liées à κ par

$$\frac{S_d}{S_l} = 1 - Ma^d \frac{\delta_{th}}{S_l} \kappa, \quad (\text{F.20})$$

$$\frac{S_c}{S_l} = 1 - Ma^c \frac{\delta_{th}}{S_l} \kappa, \quad (\text{F.21})$$

où Ma^d et Ma^c sont les nombres de Markstein pour respectivement S_d et S_c .

- Pour les carburants avec $Le_{fuel} \simeq 1$ (i.e. CH_4), les gradients d'espèces et de température augmentent dans les mêmes proportions que κ . La flamme devient plus fine mais la consommation globale n'est pas affectée.
- Si $Le_{fuel} < 1$ Markstein est négatif et S_c augmente linéairement avec κ .
- Si $Le_{fuel} > 1$ Markstein est positif et S_c décroît lorsque κ augmente.

Ces analyses sont faites avec une chimie une étape irréversible et peuvent donc ne pas être valides pour des chimies complexes avec Lewis variable. Cependant, les effets d'étirement et de courbature peuvent être en première approche évalués sur ces configurations canoniques.

EVALUATION DES EFFETS D'ÉTIREMENTS La configuration canonique utilisée afin d'évaluer les effets d'étirement est présentée [FIG. F.3](#). Un mélange carburant et d'oxydant est injecté du côté gauche avec une vitesse u_u tandis que des produits de combustion sont injectés du côté droit avec une vitesse u_b . En faisant varier les vitesses, le taux global d'étirement a

$$a = \frac{u_f + u_b}{d} \quad (\text{F.22})$$

varie. Le front de flamme se stabilise et l'impact du taux d'étirement sur la vitesse de consommation ([EQ. F.13](#)) peut être évalué.

EVALUATION DES EFFETS DE COURBATURE Les effets de courbature sont par définition des effets 2D ou 3D et ne peuvent pas être évalués par des configurations canoniques 1D. Les effets de courbature doivent être évalués par des interaction flamme-vortex 2D ou 3D [147].

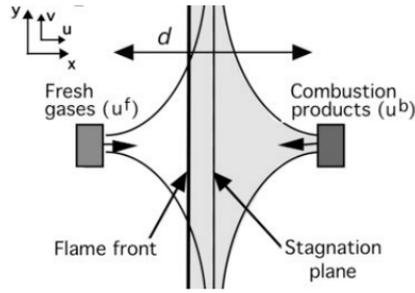


FIGURE F.3 – Schéma d'une flamme prémélangée étirée [148].

F.1.3 INTERACTION FLAMME-TURBULENCE

L'interaction entre la flamme et la turbulence peut être évaluée par le rapport entre un temps caractéristique de l'écoulement et un temps caractéristique de la flamme.

- Le nombre de **Damköhler** est défini comme le rapport entre la plus grande échelle de temps de la turbulence et le temps caractéristique de la chimie

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t S_l}{\delta_l u'_t} \quad (\text{F.23})$$

Lorsque $Da \gg 1$, la surface de la flamme est plissée et étirée par la turbulence. Cependant, sa structure interne n'est pas directement impactée par la turbulence. Dans ce régime nommé *flamelet regime*, la structure de la zone de réaction correspond localement à une flamme laminaire. Lorsque $Da \ll 1$ les réactifs et les produits sont mélangés de façon intense et réagissent selon des réactions lentes en comparaison avec le temps de mélange. Dans les applications pratiques, le premier régime correspondant à $Da \gg 1$ est généralement trouvé pour l'oxydation du carburant mais des processus plus lents comme des réactions post-flamme déroulent à $Da \ll 1$.

- Le nombre de **Karlovitz** caractérise l'interaction avec les échelles chimiques et le plus petit temps caractéristique de la turbulence (Kolmogorov)

$$Ka = \frac{1}{Da(\eta_\kappa)} = \frac{\delta_l u_{\eta_\kappa}}{\eta_\kappa S_l} \quad (\text{F.24})$$

Le nombre de Reynolds turbulent peut être écrit

$$Re_t = Da^2 Ka^2 \quad (\text{F.25})$$

Re_t est donc lié aux deux nombres adimensionnels. Il peut être utilisé pour estimer les régimes de combustion. Les régimes de combustion peuvent être placés sur un diagramme (FIG. F.4). FIG. F.5 illustre les régimes de combustion qui suivent.

- *Laminar flame regime* ($Re_t < 1$) : l'écoulement est quasi laminaire, la flamme est très peu plissée.
- *Thin flame regime* ($Re_t < 1, Ka < 1$). En fonction de $\frac{u'}{S_l}$ il est possible de le décomposer en deux régimes :
 1. *Wrinkled flamelet regime* ($Ka < 1, u'/S_l < 1$). L'épaisseur de flamme est plus petite que la longueur de Kolmogorov : le régime est de type *flamelet regime*. En raison de l'intensité modérée des fluctuations turbulentes, la surface de la flamme est peu plissée et étirée par les petites structures turbulentes.
 2. *Corrugated flamelet regime* ($Ka < 1, u'/S_l > 1$) L'intensité de la turbulence est plus importante, la surface de la flamme est plissée et étirée par la turbulence. Des poches isolées de réactions se forment.

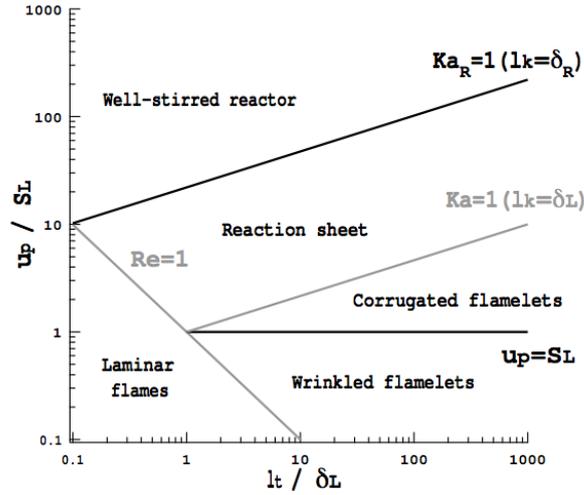


FIGURE F.4 – Régimes de combustion turbulente [143].

- *Thickened wrinkled flame or reaction-sheet regime* ($Re_t > 1$, $Ka > 1$, $Ka_r < 1$, $Da > 1$) Les plus petits tourbillons sont plus petits que l'épaisseur de la flamme. Ils sont capables d'interagir avec la zone préchauffée *preheat zone* et améliore les transferts de chaleur. La zone de réaction reste cependant plus fine que les échelles de longueurs de la turbulence les plus petites ($Ka_r < 1$), la flamme garde sa structure laminaire.
- *Well-stirred reactor* ($Re_t > 1$, $Ka > 1$, $Ka_r > 1$, $Da < 1$) Les échelles les plus petites de la turbulence pénètre la zone de réaction, ce qui améliore la diffusion et le transfert de chaleur dans la zone préchauffée et dans la zone de réaction. La flamme n'a pas de structure laminaire.

F.2 COMBUSTION NON PRÉMÉLANGÉE

F.2.1 FLAMMES DE DIFFUSION LAMINAIRE

Dans le cas des flammes de diffusion, le carburant et l'oxydant ne sont pas mélangés avant la combustion. Les flammes de diffusion sont contrôlées par le mélange qui doit amener les réactifs dans la zone de réaction qui se situe près de la stœchiométrie. Dans cette zone de réaction, le carburant et l'oxydant sont mélangés avant réaction. Un schéma de ce type de flamme est disponible FIG. F.6. Le pic de température est situé dans la zone de réaction proche de la stœchiométrie et diffuse du côté des écoulements de carburant et d'oxydant.

Les flammes de diffusion ne se propagent pas et n'ont pas d'épaisseur caractéristique. La structure de la flamme est imposée par les conditions extérieures, notamment de l'étirement.

L'état du mélange peut être décrit par une fraction de mélange Z . Cette fraction de mélange peut être définie par la définition de Bilger [13] basée sur la fraction massique atomique

$$\beta = \sum_{i=1}^{N_a} \gamma_i Z_i = \sum_{i=1}^{n_{spec}} \gamma_i \sum_{j=1}^{N_a} n_{ij} \frac{W_i Y_j}{W_j}, \quad (\text{F.26})$$

où n_{ij} est le nombre d'atomes du $i^{\text{ème}}$ élément dans la $j^{\text{ème}}$ espèce et N_a est le nombre total d'atomes. γ_i sont les facteurs de pondération, avec $\gamma_C = 2/W_C$, $\gamma_H = 1/(2W_H)$ et $\gamma_O = -1/W_O$ selon Bilger. β est alors normalisée par sa valeur dans l'oxydant β_o et sa valeur dans le carburant β_f afin d'obtenir la fraction de mélange

$$Z = \frac{\beta - \beta_o}{\beta_f - \beta_o}. \quad (\text{F.27})$$

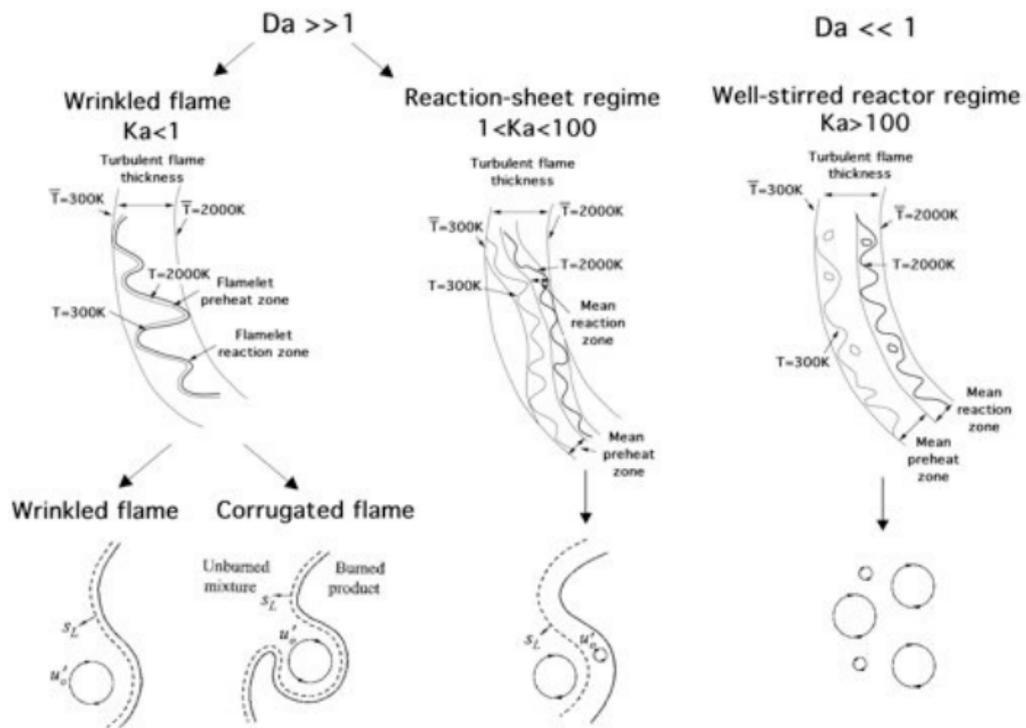


FIGURE F.5 – Illustration de différents régimes de combustion turbulente (Poinso and Veynante [148], Law et al. [107]).

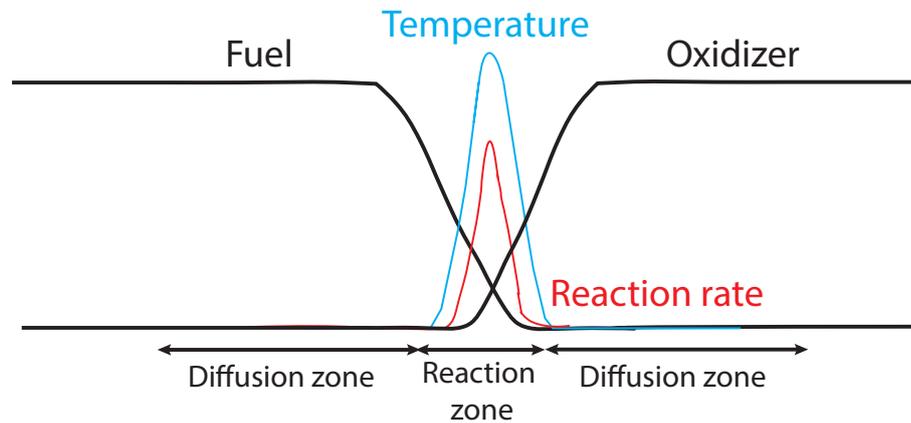


FIGURE F.6 – Structure d'une flamme de diffusion.

Par définition, la fraction de mélange ne dépend pas des réactions chimiques. Sous l'hypothèse de nombre de Schmidt égaux, Z se comporte comme un scalaire passif et son équation de transport s'écrit

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho Z u_j) = \frac{\partial}{\partial x_l} \left[\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_l} \right]. \quad (F.28)$$

Cela permet de décomposer la résolution en un problème de mélange et un problème de structure de flamme. Si le nombre de Lewis est égal à l'unité, les équations bilans pour les espèces et pour la température peuvent être écrites dans l'espace de Z en introduisant le taux de dissipation scalaire $\chi = 2D |\nabla Z|^2$ [22]

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{w}_k, \quad (\text{F.29})$$

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{1}{2} \rho \chi \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \dot{w}_T. \quad (\text{F.30})$$

Dans EQ. F.29 et EQ. F.30, le taux de dissipation scalaire est le seul paramètre qui dépend de l'espace. Si χ est connu, les deux équations peuvent directement être résolues dans l'espace de Z . Le taux de dissipation scalaire caractérise l'intensité du mélange et donc les flux moléculaires vers la zone de réaction. Une épaisseur de la zone de mélange peut être estimée selon

$$l_Z = \sqrt{\frac{D}{\chi}} = \frac{1}{|\nabla Z|}. \quad (\text{F.31})$$

Une épaisseur de la zone de réaction peut également être estimée [114]

$$l_{\text{reac}} \propto l_Z \left(Da^{fl} \right)^{-1/b}, \quad (\text{F.32})$$

où $b = 1 + \nu'_O + \nu'_F$.

La flamme de diffusion stationnaire étirée est un archétype important qui est à la base de nombreux modèles de chimie tabulée pour les flammes prémélangées. Un schéma de ce type de flamme est donné FIG. F.7.

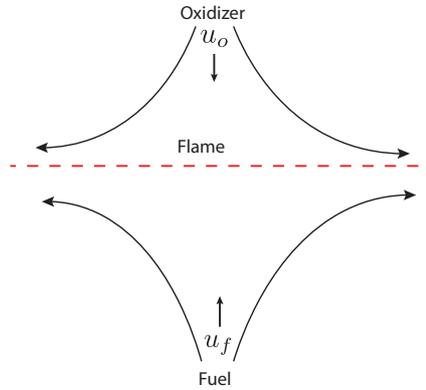


FIGURE F.7 – Flamme de diffusion stationnaire étirée.

Le taux d'étirement peut être estimée selon

$$a \simeq \frac{u_u + u_o}{L} \quad (\text{F.33})$$

où u_f et u_o sont respectivement la vitesse du carburant et de l'oxydant et L est la distance entre les deux entrées. Sous l'hypothèse de chimie infiniment rapide, les relations suivantes peuvent être démontrées [148] :

$$\dot{\Omega}_{fuel} \propto \sqrt{aD} \quad (\text{F.34})$$

$$(\text{F.35})$$

$$\chi \propto a. \quad (\text{F.36})$$

En comparaison avec les flammes prémélangées pour lesquelles le taux d'étirement introduit une faible correction linéaire à la vitesse de consommation qui reste piloté par les propriétés intrinsèque de la flamme de prémélange, le taux de dissipation scalaire controle directement la vitesse de consommation (intégrale du terme source du carburant le long de la normale à la flamme de diffusion). La flamme de diffusion est alors plus sensible aux conditions locales de l'écoulement pour lesquelles le taux de dissipation scalaire en résulte.

EFFETS DE LA CHIMIE NON INFINIMENT RAPIDE Le nombre de Damköhler peut toujours être défini

$$Da^{fl} = \frac{\tau_f}{\tau_c} \simeq \frac{1}{\chi_{st}\tau_c}, \quad (\text{F.37})$$

où τ_c est le temps caractéristique de la chimie et χ_{st} est le taux de dissipation scalaire à la stœchiométrie.

Pour de faibles étirements, la théorie dérivée pour une chimie infiniment rapide reste valide. FIG. F.8 montre la déviation de la réponse de la chimie non infiniment rapide lorsque le taux de dissipation scalaire augmente. La température maximale décroît jusqu'à ce que l'extinction ait lieu.

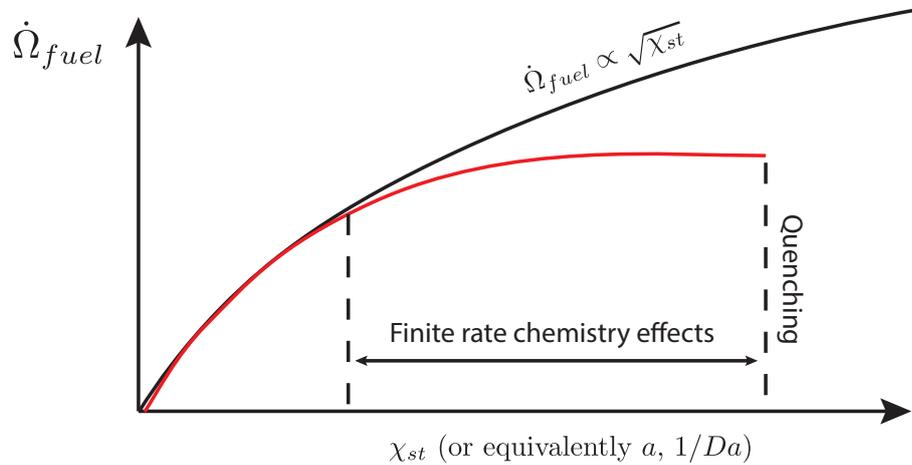


FIGURE F.8 – Vitesse de consommation d'une flamme de diffusion en fonction du taux de dissipation scalaire (ou de façon équivalente le taux d'étirement a ou l'inverse du nombre de Damköhler $1/Da$) pour une chimie infiniment rapide (noir) et pour une chimie non infiniment rapide (rouge).

F.2.2 FLAMMES DE DIFFUSION TURBULENTE

Alors que les flammes prémélangées possèdent des propriétés intrinsèques, la structure des flammes de diffusion est gouvernée par le taux de dissipation scalaire. FIG. F.9 propose une illustration des échelles de temps et de longueur liées à l'écoulement et à la flamme.

Les régimes de combustion peuvent être estimés par comparaison de ces échelles. Différents régimes peuvent être identifiés dans un diagramme log-log en fonction du nombre de Reynolds turbulent Re_t et du nombre Damköhler $Da = \tau_t/\tau_c$ [35] (FIG. F.10).

- Le régime *flamelet regime* correspond à Da^{fl} plus petit qu'un seuil critique Da^{LFA} (Laminar Flamelet Assumption), la structure interne de la flamme n'est pas affectée par la turbulence.
- Lorsque Da^{fl} est plus grand qu'un seuil critique Da_{ext} , la flamme est éteinte parce que les temps caractéristiques de la chimie sont trop grands en comparaison aux temps caractéristiques du mélange.
- Entre les deux seuils critiques, une situation intermédiaire est présente avec de forts effets instationnaires.

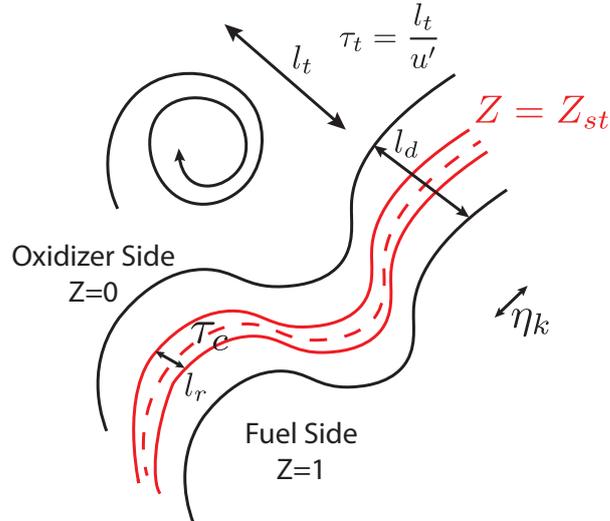


FIGURE F.9 – Échelles diverses dans une flamme de diffusion turbulente. Échelles turbulentes : échelle intégrale l_t , échelle intégrale de temps τ_t et échelle de Kolmogorov η_k . Échelles de la flamme : épaisseur de diffusion l_d , épaisseur de la zone de réaction l_r et échelle de temps chimique τ_c .

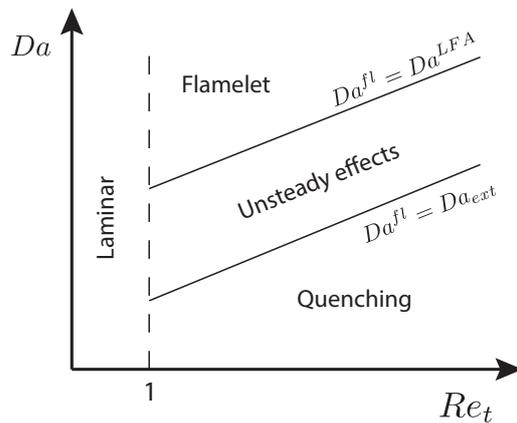


FIGURE F.10 – Régimes de combustion turbulente non prémélangée en fonction du nombre de Damköhler Da et du nombre de Reynolds turbulent Re_t [35].

F.3 RÉOLUTION DE L'INTERACTION DE SOUS MAILLE CHIMIE-TURBULENCE

L'opération de filtrage introduit par le formalisme LES laisse des termes source chimique non résolus. Ces termes sources ont lieu à une échelle très petite et sont fortement non linéaires. De plus, ils sont très sensibles aux échelles non résolues de la turbulence, ce qui rend leur évaluation correcte d'une importance critique dans les calculs LES. Les approches générales pour résoudre cette problématique sont présentées au cours de cette section.

Différents modèles sont disponibles pour décrire la structure de flamme. Ils sont regroupés ici en deux catégories en fonction de la façon de considérer le front de flamme :

- Modèle de flamme infiniment mince : la flamme turbulente prémélangée est modélisée comme une interface entre les gaz frais et les gaz brûlés. Dans ce type de modèle, la flamme est localement supposée laminaire, ce qui implique que la combustion doit avoir lieu dans un régime où la turbulence ne peut pas modifier la structure interne de la flamme (régime de flammelle). Sous ces hypothèses, les termes sources chimiques et de température sont directement liés à la surface de flamme. Il reste alors à modéliser la surface de flamme, soit grâce à un modèle de suivi d'interface [145, 127], soit grâce à un modèle de densité de surface de flamme [82].

— Modèle décrivant la zone de réaction : la structure de la flamme est décrite par le modèle de combustion. Parmi ces modèles se trouvent les modèles à transport de Fonction de Densité de Probabilité (PDF) [43], les modèles de tabulation tel que F-TACLES [60] ou les modèles de flamme épaissie TF (pour *Thicken Flame* en anglais) [33, 110].

Parmi ces modèles, en particulier deux sont classiquement utilisés et validés dans un contexte de moteur à piston : le modèle de flamme cohérente Coherent Flame Model (CFM) (pour *Coherent Flame Model* en anglais) [155, 181] et de flamme épaissie TFLES [171, 52, 77].

F.3.1 MÉTHODES PDF

Dans les méthodes Probability Density Function (PDF), l'idée fondamentale est que les fluctuations perdues par la procédure de filtrage peuvent être décrites en introduisant une fonction densité de probabilité $\mathcal{P}(\Phi)$ qui décrit l'état chimique du système $\Phi = (Y_1, Y_2, \dots, Y_{n_{spec}}, T)$ [149]. Connaissant cette PDF, le terme source filtrée peut être écrit

$$\tilde{\omega} = \int \dot{\omega}(\Phi) \mathcal{P}(\Phi) d\Phi. \quad (\text{F.38})$$

Il reste alors à obtenir la fonction densité de probabilité.

Ces méthodes ne sont pas utilisées au cours de la présente étude et ne seront donc pas détaillées. Néanmoins, le lecteur peut se référer à [148, 182, 112, 42, 121, 87, 61, 64, 94, 95, 180, 150, 97, 129, 24]

F.3.2 MODÈLE DE FLAMME ÉPAISSIE TFLES

L'objectif du modèle de flamme épaissie est de résoudre la structure de flamme dont l'épaisseur est en général de l'ordre de 0.1 mm, sur un maillage dont la taille caractéristique est supérieure à cette épaisseur. Avec le modèle TFLES, les termes sources sont fermés par des lois d'Arrhénius et la flamme est épaissie artificiellement. L'épaississement de la flamme est obtenue en multipliant la diffusion thermique par un facteur F afin de disposer de suffisamment de points de maillage pour résoudre les gradients présents dans la zone de réaction. Cette idée de flamme artificiellement épaissie à été introduite par [25]. Les principales caractéristiques de la flamme propagative que le modèle de combustion doit reproduire sont la vitesse de flamme laminaire s_L et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L . Selon la théorie des flammes laminaires prémélangées [187, 102] :

$$s_L \propto \sqrt{D_{th} A} \quad (\text{F.39})$$

$$\delta_L \propto \frac{D_{th}}{s_L} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (\text{F.40})$$

avec D_{th} la diffusion thermique et A la constante pré-exponentielle de la loi d'Arrhénius. Selon [EQ. F.39](#), si la diffusion thermique est multipliée par un facteur F , la constante pré-exponentielle doit également être divisée par le même facteur F pour conserver la vitesse de flamme s_L . Si les transformations suivantes sont appliquées

$$D \rightarrow \mathcal{F}D, \quad (\text{F.41})$$

$$\dot{\omega} \rightarrow \frac{\dot{\omega}}{\mathcal{F}}, \quad (\text{F.42})$$

alors

$$S_l \rightarrow S_l, \quad (\text{F.43})$$

$$\delta_l \rightarrow \mathcal{F}\delta_l, \quad (\text{F.44})$$

La vitesse de flamme laminaire est conservée et le front de flamme est épaissi. Cette idée fondamentale est à la base du modèle. \mathcal{F} est ajusté afin d'obtenir la discrétisation nécessaire à la résolution de la flamme. Un schéma de principe de cette méthodologie est présenté [FIG. F.11](#).

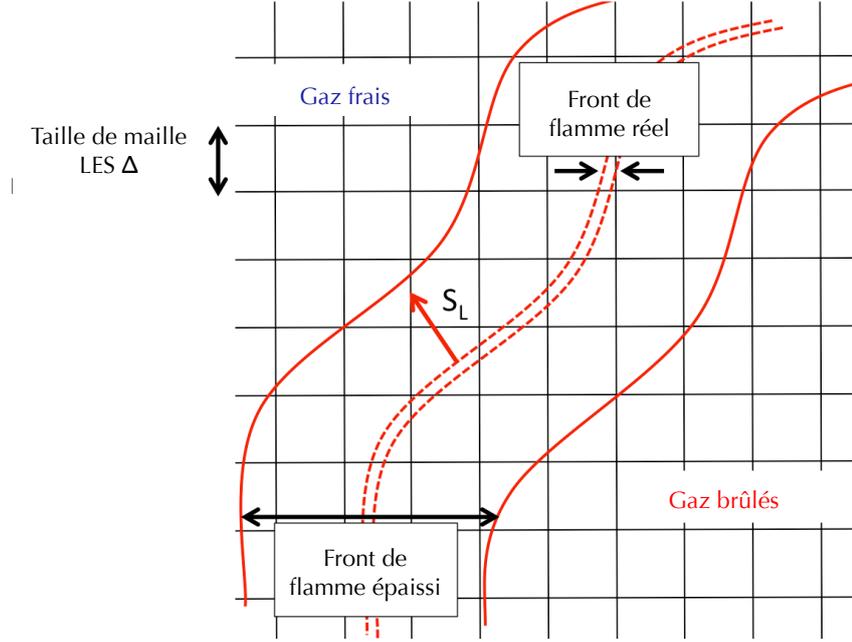


FIGURE F.11 – Schéma de principe de l'approche de flamme épaissie. Le front de flamme est artificiellement épaissi tout en conservant la vitesse de flamme.

Le fait d'épaissir artificiellement la flamme permet de résoudre sa structure sur le maillage, cependant l'interaction avec la turbulence caractérisée par le nombre de Damkolher D_a est aussi modifiée :

$$D_a = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t s_L}{u' \delta_L} \quad (\text{F.45})$$

avec τ_t le temps caractéristique des plus petites structures turbulentes et τ_c le temps caractéristique de la chimie. Il en découle que l'épaississement de la flamme par un facteur F réduit le nombre de D_a de ce même facteur. En d'autres termes, les tourbillons de taille inférieure à $F\delta_L$ ne sont plus capables de plisser la flamme. La surface de flamme turbulente est alors réduite ainsi que le taux de réaction dans le domaine de calcul. Une fonction d'efficacité ε est alors introduite pour compenser la perte de plissement due à l'utilisation du modèle de flamme épaissie :

$$\varepsilon = \frac{\Xi(\delta_L)}{\Xi(F\delta_L)} \quad (\text{F.46})$$

Plusieurs modèles d'efficacité sont disponibles dans la littérature, notamment le modèle de *Charlette et al.* [29] ou celui de *Colin et al.* [33]. Ces deux modèles font l'hypothèse d'un équilibre entre la turbulence et la surface de flamme de sous maille et les fluctuations de vitesse a la taille du filtre u'_Δ estimé selon [33]

$$u'_\Delta = c_2 \Delta_x^3 \left| \frac{\partial^2}{\partial x_j \partial x_j} \left(\epsilon_{lmn} \frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_m} \cdot \right) \right| \quad (\text{F.47})$$

Cet opérateur est basé sur le rotationnel de la vitesse afin de retirer la contribution de la dilatation. La constante $c_2 \simeq 2$ est estimée en utilisant une turbulence homogène isotrope [3]. ϵ_{lmn} est le tenseur de permutation.

— Dans le modèle de *Colin et al.* [33] le facteur de plissement est exprimé selon

$$\Xi(\delta_l) = 1 + \alpha(Re_l) \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l}, \frac{u'_\Delta}{S_l} \right) \frac{u'_\Delta}{S_l} \quad (\text{F.48})$$

où α est une fonction du nombre de Reynolds turbulent Re_t , Δ_e est la taille du filtre et Γ est une fonction qui prend en compte l'étirement de sous maille qui dépend des fluctuations de sous mailles de la vitesse et de la taille du filtre.

- Dans le modèle de *Charlette et al.* [29], une loi en puissance pour le plissement étend la formulation de *Colin et al.* de [EQ. F.48](#). Le facteur de plissement s'écrit

$$\Xi(\delta_l) = \left(1 + \min \left[\frac{\Delta_e}{\delta_l}, \Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_l}, \frac{u'_\Delta}{S_l}, Re_{\Delta_e} \right) \frac{u'_\Delta}{S_l} \right] \right)^\beta \quad (\text{F.49})$$

où $\beta \simeq 0.5$ est un paramètre du modèle. Ce paramètre peut également être calculé de façon dynamique. Contrairement au modèle de Colin, aucune quantité globale est requise car Re_{Δ_e} est basé sur la taille du filtre Δ_e et non sur l'échelle intégrale.

En résumé, le modèle de flamme épaissie est implémenté dans le code de calcul en modifiant les taux de réaction et les coefficients de diffusion de la manière suivante (avec un modèle nécessaire pour la fonction d'efficacité) :

Coefficient de diffusion :	D_{th}	\Rightarrow	FD_{th}	\Rightarrow	εFD_{th}
Taux de réaction :	$\tilde{\omega}$	\Rightarrow	$\tilde{\omega}/F$	\Rightarrow	$\varepsilon \tilde{\omega}/F$
			Épaississement		Efficacité

F.3.3 MODÈLE TFLES DYNAMIQUE

La modification des coefficients de diffusion par l'application du modèle d'épaississement de manière uniforme dans l'intégralité du domaine peut modifier l'écoulement, y compris dans les régions où aucune réaction n'a lieu. Pour améliorer ce comportement, une procédure dynamique a été introduite par [110] pour n'appliquer l'épaississement que dans les régions où la flamme est présente et en fonction de la résolution du maillage. Un capteur \mathcal{S} est utilisé pour détecter les zones de réaction :

$$F = 1 + (F_{max} - 1) \mathcal{S} \quad (\text{F.50})$$

avec F_{max} la valeur de l'épaississement déterminée à partir de la résolution locale du maillage :

$$F_{max} = N_c \frac{\Delta}{\delta_L^0} \quad (\text{F.51})$$

où N_c est le nombre de points voulu dans le front de flamme, Δ la taille de maille et δ_L l'épaisseur de flamme laminaire. Le capteur \mathcal{S} qui détecte les zones de réaction :

$$\mathcal{S} = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \quad (\text{F.52})$$

avec β une constante fixée à 50, Ω un taux de réaction représentatif de la combustion dans la cellule si elle avait effectivement lieu et Ω_0 sa valeur maximale.

$$\Omega = Y_F^{n_F} Y_O^{n_O} \exp\left(-\Gamma \frac{E_a}{RT}\right) \quad (\text{F.53})$$

Ω_0 est généralement calculé au préalable dans une configuration de flamme 1D avec le mécanisme cinétique choisi. Le coefficient Γ est utilisé pour élargir la zone d'activité du capteur et ainsi s'assurer que l'intégralité du front de flamme soit bien couverte.

Une approche alternative est utilisée pour construire le capteur \mathcal{S} lors de l'utilisation de schéma de cinétique chimique de type **ARC** car cette méthode n'est pas directement applicable dans ce cas.

L'avantage principal du modèle **TFLES** est sa simplicité et sa capacité à reproduire le comportement de la flamme. Il a été utilisé avec AVBP dans une large gamme de configurations [33, 111, 162, 188, 51] et est également utilisé dans d'autres codes de calcul tels que Fluent ou Charles (Cascade Technologies).

F.4 MODÉLISATIONS DE L'ALLUMAGE

Dans les moteurs à piston, la phase d'allumage a un impact de premier ordre sur la suite du déroulement de la combustion. Il convient donc de la décrire avec précision à l'aide de la LES. Cependant, ainsi que décrit par [123], l'allumage du mélange par l'étincelle de la bougie est le résultat de phénomènes physiques complexes : lorsque le courant entre les électrodes de la bougie atteint la tension de claquage, une décharge électrique a lieu. Un plasma se forme à haute température (de l'ordre de 60 000 K) et génère une onde de choc. Alors que le plasma se refroidit, une phase très courte, appelée "phase d'arc" initie un noyau de flamme à environ 6 000 K. Enfin, pendant la phase d'incandescence, qui dure quelques millièmes de secondes, une partie de l'énergie de la bougie (entre 10 et 30 %) est transmise au mélange et permet d'initier la combustion. Il est impossible de reproduire ces phénomènes qui font notamment appel aux équations de la magno-hydro-dynamique et à la physique des plasmas dont les temps caractéristiques sont très inférieurs aux pas de temps utilisés en LES. Les modèles disponibles pour l'allumage en LES font alors abstraction des premières phases de l'allumage et se concentrent sur la dernière phase où la plus grande partie de l'énergie est déposée. Dans certains cas, la phase de dépôt d'énergie n'est pas non plus modélisée, un noyau de gaz brûlés est directement déposé à l'emplacement de la bougie et la simulation débute une fois l'allumage du premier noyau de flamme réalisé. Dans ce document, le modèle Energy Deposition (ED) proposé par [104] pour les simulations TFLES est utilisé et détaillé par la suite.

Le modèle de dépôt d'énergie proposé par [104] vise à reproduire uniquement la dernière phase de l'allumage par bougie pendant laquelle l'énergie est transférée au gaz avec une élévation de température modérée. Un terme source volumique d'énergie \dot{Q} est alors ajouté à l'équation de l'énergie (EQ. C.3). Ce terme source est représenté par une fonction gaussienne en espace et en temps autour de la position des électrodes de la bougie pendant une durée τ_{ign} sur un diamètre de dépôt d'énergie δ_{ign} :

$$\dot{Q} = \frac{\varepsilon_T}{4\pi^2\sigma_s^3\sigma_t} \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{\sigma_s}\right)^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2}\left(\frac{(t-t_0)}{\sigma_t}\right)^2\right) \quad (\text{F.54})$$

avec ε_T l'énergie transmise au gaz, r la distance au centre de la zone de dépôt d'énergie, t le temps à l'itération courante et t_0 le temps auquel la moitié de l'énergie est déposée. σ_s et σ_t sont les taille et durée caractéristiques du dépôt d'énergie définis comme suit :

$$\sigma_s = \frac{\delta_{ign}}{2\sqrt{\ln(10^4)}} \quad (\text{F.55})$$

$$\sigma_t = \frac{\tau_{ign}}{2\sqrt{\ln(10^4)}} \quad (\text{F.56})$$

La durée, la taille et l'énergie du dépôt sont des paramètres à renseigner par l'utilisateur. L'énergie transmise est un paramètre difficile à estimer, comme décrit par [123]. Il est de l'ordre de 10 à 30 % de l'énergie fournie par la bougie. La taille du dépôt réel est de l'ordre de la distance inter-électrodes, cependant dans un contexte LES, cette dernière est souvent surestimée afin de disposer de suffisamment de points de maillage pour décrire la fonction gaussienne spatiale. La durée de dépôt est de l'ordre de la dizaine de millièmes de seconde, comme la phase d'incandescence que représente ce modèle.

 DESCRIPTION DE LA CHIMIE

La description de la chimie est de première importance afin d'obtenir une LES fidèle et représentative. Cependant, il existe un compromis entre coût et précision. Afin de décrire la structure de la flamme et la formation de certaines espèces intermédiaires ou la formation de polluants, la modélisation de la chimie doit être apte à capturer les interactions complexes entre la flammes et l'écoulement, tout en gardant un cout de calcul acceptable pour la simulation numérique tri dimensionnelle.

G.1 CHIMIE DÉTAILLÉE

Les mécanismes détaillés contiennent une description complète de la chimie. Ils peuvent contenir des centaines d'espèces et faire intervenir des milliers de réactions élémentaires. Ils sont construits de façon à reproduire un large pannel de phénomènes tels que les processus d'auto allumage, l'extinction, les flammes prémélangées ou non prémélangées, ... Ces mécanismes représentent les interactions qui se produisent au niveau moléculaire. Le taux de réaction d'une réaction j



qui implique les espèces A, B, C et D est exprimé selon une loi d'Arrhenius

$$\dot{r}_j = k_j [A][B] T^{\beta_i} \exp\left(\frac{-E_{a,i}}{RT}\right), \quad (\text{G.2})$$

où $[X] = \frac{\rho Y_X}{W_X}$ est la concentration de l'espèce X, k_j et $E_{a,i}$ sont respectivement la constante pré exponentielle et l'énergie d'activation de la réaction et β_i est l'exposant de la température. Des expressions légèrement modifiées peuvent être employées pour certaines réactions impliquant une troisième espèce ou des réactions dépendantes de la pression.

Cependant, les mécanismes détaillés sont hors de portée pour des calculs LES tri dimensionnels et très peu utilisés pour les DNS. En effet, les échelles de temps de longueurs qui peuvent être nécessaires afin de résoudre de tels mécanismes sont encore inaccessibles avec les ressources de calculs disponibles. De plus, le nombre d'espèces transportées augmente d'autant plus le coût de calcul et de mémoire. En pratique l'utilisation directe de ces mécanismes est réservé aux codes de calculs purement chimiques tels que Cantera par exemple [41] ou à certains codes de DNS [11, 135, 168, 158]. Néanmoins, pour des mélanges simples de méthane et d'air, le cout du calcul peut être acceptable dans certaines situations : un mécanisme détaillé à été utilisé par Navarro-Martinez *et al.* [128] sur une LES d'une flamme *lifted methane-air jet flame*.

G.2 CHIMIE TABULÉE

L'idée principale de ce modèle est basée sur l'hypothèse de flammelettes : les temps caractéristiques de la chimie sont petits de sorte que les structures de flamme locales restent proche d'une flamme laminaire. Les modèles de flammelettes ont été introduit par Peters [140, 141] pour les problèmes non prémélangés. Ils peuvent également être utilisés pour des applications partiellement prémélangées ou prémélangées.

- Pour les problèmes applications partiellement prémélangées ou prémélangées, des flammes laminaires prémélangées sont choisies comme référence. La fraction de mélange Z est employé afin de décrire l'état de mélange et une variable de progrès c (EQ. F.7) est utilisée pour caractériser l'évolution de la réaction dans l'espace. Cette approche est par exemple employée dans le modèle Flame Prolongation of Intrinsic Low-Dimensional Manifold (FPI) de Gicquel *et al.* [69] et le modèle Flame Generated Manifold (FGM) de Van Oijen *et al.* [132]. En ce basant sur ces variables de contrôle, les termes sources chimiques et le terme source de la variable de progrès sont lus dans une table préalablement générée

$$\dot{\omega}_X = \dot{\omega}_X(Z, c, \dots) . \quad (\text{G.3})$$

Dans les calculs LES, les espèces intermédiaires sont extraites de la tabulation et le transport de la variable de progrès est assurée à l'aide du terme source extrait de la tabulation.

- Pour les problèmes non prémélangés, des flammes de diffusion à contre courant peuvent être employées de sorte à générer la tabulation. La table est alors paramétrisée par Z et par le taux de dissipation scalaire χ_Z [146].

Ces modèles de chimie tabulée ont été très utilisés pour la prédiction des polluants [87, 137, 59, 61] en raison de leurs capacités à reproduire les effets d'une chimie détaillée tout en gardant le coût de calcul raisonnable. Cependant, ils souffrent de quelques limitations :

- Afin de promouvoir le mélange, les systèmes de combustion sont généralement swirlés et fortement turbulents. Les effets d'étirement et de courbature de la flamme sont alors très élevés et la flamme est souvent diluée par les gaz brûlés. Ces effets ne sont généralement pas correctement pris en compte avec la chimie tabulée.
- La structure de la flamme doit être connue *a priori*. Or, des multiples régimes de combustion sont souvent présent dans les systèmes de combustion complexes. Il est alors difficile, voire impossible, de trouver une flamme de référence acceptable pour construire la tabulation.
- La prise en compte des pertes de chaleurs aux parois ou des processus de radiation est complexe [87, 61, 152].
- Il est difficile de modéliser les processus de réaction lente telle que l'oxydation post flamme de NO_x et de CO .

G.3 CHIMIE GLOBALEMENT RÉDUITE

Les schémas GRC ne reproduisent pas les détails de la physique des mécanismes détaillés. Ils sont construits de façon à reproduire des propriétés essentielles telles que la vitesse de consommation, l'épaisseur de flamme et la température adiabatique fin de combustion. Ils sont généralement composés de 6 espèces et de 2 étapes de réaction. Leur coût est très réduit et leur implémentation dans les calculs LES est directe. Parmi ces schémas, il est possible de citer les schémas 2 étapes 2S_CH4_BFER [63, 161] ou 2S_KERO_BFER qui sont aujourd'hui très utilisés dans l'industrie.

DÉRIVATION DES SCHÉMAS GRC Le processus de dérivation des schémas doit être basé sur des algorithmes d'optimisation tels que des algorithmes génétiques [49]. Des approches plus empiriques peuvent également être utilisées. La méthodologie 2S_BFER [65], potentiellement applicable à n'importe quel carburant, fait l'hypothèse d'un mécanisme en deux étapes



où F est le carburant. Les réactions de ces étapes sont écrites sous forme de loi d'Arrhenius mais ne correspondent pas à des réactions élémentaires. Par exemple, la première réaction s'écrit

$$\dot{r}_1 = f_1(\phi) k_1 [F]^{n_1} [\text{O}_2]^{n_2} T^{\beta_1} \exp\left(\frac{-E_{a,1}}{RT}\right) . \quad (\text{G.6})$$

k_1 et $E_{a,1}$ peuvent être ajustés afin de produire la bonne vitesse de flamme alors que n_1 et n_2 sont ajustés afin de retrouver une dépendance en pression correcte vis à vis de l'évolution de la vitesse de

flamme laminaire [65]. De plus, f_1 est une fonction du ratio d'équivalence afin d'assurer des vitesses de flammes correctes à richesse élevée. Le rôle essentiel de la réaction 2 est la prédiction correcte de la température fin de combustion via l'équilibre $CO - CO_2$.

LIMITATIONS DES SCHÉMAS GRC

- Les schémas deux étapes sont, par construction, précis sur des problèmes canoniques et dans la plage pour laquelle ils ont été construits. Ils ne sont pas basés sur des principes physiques et leur comportement correct en dehors de cette plage de validité n'est pas garantie.
- Les informations des espèces intermédiaires sont généralement perdues ou inexactes. Ils ne sont pas capables de prédire les polluants correctement.
- Leur réponse à l'étirement ou au plissement peut être inexacte.

G.4 MÉCANISME SQUELETTE

Les schémas mécanisme squelette (*skeletal mechanisms* en anglais) sont obtenus par la réduction des mécanismes détaillés. Les mécanismes détaillés sont construits de sorte à décrire une large variété de phénomènes (auto allumage, extinction, chimie basse température, ...) sur une large plage de pression, température et rapport d'équivalence. Cependant, les conditions opératoires sont souvent connues *a priori* et la propagation de flamme est souvent le mécanisme prédominant. La chimie n'a donc pas besoin d'inclure une si grande variété de phénomènes sur une si large plage de fonctionnement. Les espèces et les réactions qui ne sont pas utiles pour l'étude sont simplement retirées du mécanisme détaillé, c'est la réduction squelettique. En comparaison avec les mécanismes détaillés, les mécanismes squelettiques ne contiennent que les espèces et les réactions qui sont utiles à l'étude considérée. Cela peut réduire le coût de calcul de façon significative.

De nombreuses techniques sont disponibles afin d'identifier les espèces et les réactions qui peuvent être retirées du mécanisme détaillé sans altérer la physique que l'on souhaite observer. Des méthodes graphiques telles que la méthode *Directed Relation Graph* [117] et *Directed Relation Graph with Error Propagation* [139] sont souvent utilisées.

LIMITATIONS

- Le nombre d'espèces présent reste souvent élevé.
- Les réactions intermédiaires sont temporellement et spatialement raides. La résolution spatiale et temporelle nécessaire est très élevée et souvent hors de portée en LES. De plus, les intégrations implicites des réactions raides nécessitent l'évaluation d'une matrice Jacobienne dont le coût évolue en n_{spec}^3 [119]. Les intégrations explicites doivent être préférées car elles sont bien moins coûteuses mais elles ne peuvent être stables que si les temps caractéristiques de la chimie plus petits que le temps d'intégration du calcul sont retirés ou traités de façon alternative.

G.5 CHIMIE ANALYTIQUEMENT RÉDUITE

L'objectif de cette section est d'introduire la méthodologie ARC pour la modélisation de la chimie et la prédiction des espèces intermédiaires et de la structure des flammes dans le contexte LES. La méthodologie ARC consiste à réduire un mécanisme détaillé en identifiant et éliminant les espèces et les réactions d'importance mineure et en utilisant des relations algébriques pour décrire l'évolution de certaines espèces. Le mécanisme ainsi réduit provient d'un mécanisme détaillé et contient une partie de la physique de ce dernier, en opposition au schéma GRC SECTION G.3. En gardant cette attache à la chimie de référence, l'évolution des espèces intermédiaires et le comportement général du schéma de cinétique chimique est plus réaliste, notamment lorsque les cas étudiés s'éloignent des cas canoniques de référence.

- Deux types de réduction peuvent être appliqués à un mécanisme détaillé, afin d'obtenir :
- un mécanisme squelette, voir SECTION G.4;

— un chimie analytique, où l'évolution de certaines espèces dont le temps caractéristique est très petit est exprimée par des relations algébriques.

Une description complète des méthodes utilisées afin de parvenir à ces réductions est proposée par A. Felden [58]. Cette section introduit simplement la notion de chimie analytique, via l'approximation d'espèces en état quasi-stationnaire qui permet d'établir une relation algébrique pour leur évolutions.

QUASI STEADY STATE APPROXIMATION Une espèce **QSS** possède un temps caractéristique de destruction très petit de sorte à ce que son taux de création soit rapidement balancé par son propre taux de destruction. De ce fait, l'espèce reste en faible concentration avec un taux de production faible en comparaison avec ses taux de création et de destruction. L'équation de conservation pour la $k^{\text{ème}}$ espèce peut être écrite en terme de concentration c_k

$$\frac{Dc_k}{Dt} = S_{diff,k} + \dot{\omega}_{c_k}^+ - \dot{\omega}_{c_k}^-, \quad (\text{G.7})$$

où le taux de production $\dot{\omega}_{c_k}$ est décomposé en un taux de création $\dot{\omega}_{c_k}^+$ et un taux de destruction $\dot{\omega}_{c_k}^-$. $S_{diff,k}$ est la contribution du flux diffusif. Considérant des réactions élémentaires, le terme de destruction est proportionnel à la concentration de l'espèce. [EQ. G.7](#) peut alors être écrite comme

$$\frac{Dc_k}{Dt} = S_{diff,k} + \dot{\omega}_{c_k}^+ - \frac{c_k}{\tau_{dk}}, \quad (\text{G.8})$$

où τ_{dk} est l'échelle de temps caractéristique du taux de destruction. Pour que l'approximation **QSS** soit acceptable, le processus de destruction doit être plus rapide que les autres processus et donc

$$\tau_{dk} = \epsilon, \text{ avec } \epsilon \rightarrow 0. \quad (\text{G.9})$$

D'une analyse asymptotique de [EQ. G.8](#), il peut être démontré que

$$c_k = O(\epsilon) = \epsilon \dot{\omega}_{c_k}^+ = \tau_{dk} \dot{\omega}_{c_k}^+, \quad (\text{G.10})$$

ce qui peut être écrit

$$\frac{dc_k}{dt} = \dot{\omega}_{c_k} = \dot{\omega}_{c_k}^+ - \dot{\omega}_{c_k}^- = 0. \quad (\text{G.11})$$

[EQ. G.10](#) ou [EQ. G.11](#) donne l'expression de la concentration de l'espèce **QSS**. Cette concentration est faible et ne dépend pas du phénomène de transport. Le couplage est linéaire de sorte à ce que l'expression soit facilement résolue dans le solveur **LES**. Plusieurs méthodes sont disponibles afin de sélectionner les espèces **QSS** appropriées [174, 118, 115]. Une des méthode utilisée dans l'outil YARC est la méthode Level Of Importance (**LOI**) [115, 116]. Une fois les espèces **QSS** identifiées, un système doit être résolu satisfaisant

$$\dot{\omega}_k = 0, \quad (\text{G.12})$$

pour chaque espèce **QSS** k . Les termes sources des espèces **QSS** peuvent être écrits sous forme d'un système linéaire fonction des concentrations des espèces **QSS**. Dans ce but, les réactions entre espèces **QSS** doivent être retirées : les réactions entre deux espèces **QSS** ont généralement un taux de réaction négligeable en raison de la faible concentration des deux espèces **QSS** impliquées. Une fois le système linéaire obtenu, il peut être inversé analytiquement afin d'obtenir les expressions des concentrations des espèces **QSS**.

G.5.1 L'OUTIL YARC

L'outil YARC a été développé par P. Pepiot-Desjardins *et al.* [138], il est utile afin de dériver des schémas **ARC** depuis des mécanismes détaillés. L'outil incorpore des techniques de réduction de type Directed Relation Graph method with Error Propagation (**DRGEP**) et **LOI** introduit [SECTION G.4](#) et [SECTION G.5](#). Les simulations générées au cours de l'application de la réduction sont réalisées en utilisant

le code FlameMaster [144]. L'interaction entre FlameMaster et l'algorithme de réduction est assurée par l'outil YARC. Les cas canoniques qui peuvent être utilisés pour le processus de réduction sont de type : processus d'auto-ignition, flamme 1D prémélangée, et flamme de diffusion. Ces cas canoniques peuvent être combinés pendant le processus de réduction. Les plages de pression, de température et de richesse dans lesquelles l'utilisateur souhaite réaliser le processus de réduction sont à définir par l'utilisateur.

G.5.2 DÉRIVATION DE SCHÉMA ARC

Le processus de réduction peut avoir divers objectifs. Il est souvent nécessaire de conserver des propriétés essentielles telles que la vitesse de consommation, la température de flamme adiabatique, le délai d'auto inflammation, la formation de certaines espèces intermédiaires, ... La réduction à l'aide de l'outil YARC nécessite la connaissance d'un mécanisme détaillé qui sert de référence au cours du processus de réduction. Le choix des cas canoniques utilisés au cours du processus de réduction sont cruciaux : ils doivent correspondre au mieux au régime de combustion de l'application finale. Ils doivent également être cohérents avec les objectifs définis.

PREMIÈRE ÉTAPE : SKELETAL REDUCTION La première étape consiste à identifier et éliminer les espèces d'importance mineure. La méthode DRGEP [139] est utilisée pour cela.

SECONDE ÉTAPE : QSSA Afin de réduire le schéma de façon plus importante, la méthode *Quasi Steady State approximation* est employée. Les espèces QSS appropriées sont identifiées en utilisant le critère LOI [116, 115]. Des expressions analytiques sont utilisées pour décrire la concentration des espèces QSS. Le schéma réduit est par la suite converti en une *subroutine* Fortran afin d'être employé dans le code AVBP.

G.5.3 TRANSPORT DES ESPÈCES DANS LE CONTEXTE LES - ARC

Comme détaillé EQ. C, dans le code AVBP, un modèle de transport simplifié est utilisé afin d'éviter un coût de calcul trop important lié aux coefficients de transport binaire. Un nombre de Schmidt constant pour chaque espèce ainsi qu'un nombre de Prandtl constant est utilisé afin de calculer les coefficients de diffusivité thermique et diffusivité moléculaire. Ces coefficients doivent être choisis avec beaucoup d'attention.

Pour les schémas GRC, les nombres de Schmidt des espèces sont généralement égaux et constant, avec l'hypothèse de Lewis unitaire. Cette hypothèse est faite *a priori* et est prise en compte lors de l'optimisation du schéma GRC afin de reproduire les caractéristiques essentielles de la flamme.

Pour la chimie ARC, la réduction n'est pas aussi drastique que pour les schémas 2 étapes GRC et le processus de réduction préserve mieux la physique du mécanisme détaillé. Les paramètres des réactions (constantes pré exponentielle, énergies d'activation, ...) sont issus de la chimie détaillée. Aucune hypothèse *a priori* est réalisée sur les propriétés de transport. Pour retrouver la validité de la chimie ARC en LES (vitesse de consommation, température adiabatique, délai d'auto allumage, réponse à l'étiement et à la courbature, ...), des propriétés de transport réalistes doivent être utilisées. Il est possible d'utiliser les nombres de Schmidt et de Prandtl dans les gaz brûlés issus de calculs CANTERA avec transport détaillé. Ce choix peut se justifier par le fait que les zones de réaction où le processus de diffusion est important sont généralement situées à haute température.

SCHÉMAS NUMÉRIQUES

Comme expliqué précédemment, la simulation numérique des fluides se base sur une discrétisation des équations de Naviers-Stokes pour résoudre spatialement et temporellement l'écoulement. Pour cela une méthode de discrétisation est nécessaire. Le code de calcul AVBP intègre plusieurs schémas de discrétisation, y compris des schémas d'ordre élevé basés sur une approche de type volumes finis ou éléments finis. Dans ce chapitre sont présentés brièvement les schémas utilisés au cours des travaux qui alimentent ce document. Plus de détails sont disponibles dans la thèse de [105].

LE SCHÉMA LAX-WENDROFF Le schéma de LW [108] a originellement été introduit pour prédire les écoulements météorologiques. Ce schéma de discrétisation totale (i.e. il comprend la discrétisation spatiale et temporelle) fait appel à un formalisme volume finis. La discrétisation spatiale est composée d'un terme centré et d'un terme de décentrement qui apporte la stabilité au schéma. Sa précision en espace et en temps est du deuxième ordre. Ce schéma est peu coûteux en ressource et robuste mais le terme de décentrement introduit également une diffusion numérique importante.

LES SCHÉMAS TAYLOR-GALERKIN À DEUX ÉTAPES Deux schémas de la famille Taylor Galerkin sont disponibles dans AVBP et ont été utilisés pendant cette travail : TTGC et TTG4A [31]. Ces schémas ont été introduits pour améliorer la précision et réduire la dissipation du schéma LW, notamment sur les petites structures turbulentes. Ils sont centrés en espace et utilisent une approche de type éléments finis pour déterminer les flux aux frontières de chaque élément. La précision spatiale est d'ordre 3 et la précision temporelle est améliorée par une procédure à deux étapes. La différence entre TTGC et TTG4A réside dans l'estimation des termes à l'étape intermédiaire qui diffère entre les deux schémas. Le schéma TTGC est précis au troisième ordre en temps, il introduit peu de diffusion et de dispersion, y compris aux plus grands nombres d'onde c'est à dire pour les plus petites structures turbulentes résolues. Le schéma TTG4A atteint une précision du quatrième ordre mais introduit plus de dissipation. Un surcoût de l'ordre de 2.5 fois le coût de calcul du schéma LW est obtenu avec les schémas de type TTG notamment en raison de la méthodologie à deux étapes et à l'approche éléments finis choisie qui nécessite l'inversion d'une matrice de masse. Ils sont également moins stables que LW à cause de leur moindre dissipation aux grands nombres d'onde qui ne permet pas de dissiper les éventuelles oscillations non physiques introduites par de forts gradients ou par une mauvaise gestion des conditions limites par exemple.

H.0.1 VISCOSITÉ ARTIFICIELLE

Dans certains cas de forts gradients peuvent être présents dans l'écoulement. Lorsque ces gradients ne peuvent pas être résolus sur le maillage, les schémas de discrétisation peuvent faire apparaître des oscillations nœud à nœud non physiques (*wiggles* en anglais). L'utilisation de schémas centrés à faible dissipation en LES ne permet pas de dissiper ce type de fluctuations non physiques. Pour éviter ce phénomène, les forts gradients sont détectés et adoucis artificiellement à l'aide d'un viscosité artificielle de deuxième ordre. Un opérateur de viscosité du quatrième ordre est également disponible pour supprimer les oscillations hautes fréquences non détectées par l'opérateur du second ordre.

H.0.2 ÉVALUATION DES TERMES SOURCE CHIMIQUES

- Dans AVBP, la procédure d'évaluation du terme source chimique dépend du schéma numérique :
- Évaluation des termes sources aux nœuds : pour les schémas de type volume fini (*i.e.* Lax-Wendroff), les termes source chimiques sont évalués aux nœuds du maillage, de la température et de la composition du mélange aux nœuds.
 - Évaluation des termes sources aux cellules : pour les schémas de type élément fini (*i.e.* TTGC), une approche *cell-vertex* est employée : les termes source chimiques sont évalués aux centres des cellules. FIG. H.1 présente la procédure. Premièrement, une opération appelée *gather* est utilisée afin d'évaluer les valeurs aux centres des cellules depuis les valeurs aux nœuds du maillage. En se basant sur les valeurs de température et de composition aux cellules après l'opération de *gather*, les termes source chimiques aux centres des cellules sont évalués. Ces termes sources sont par la suite redistribués aux nœuds via une opération appelé *scatter*.

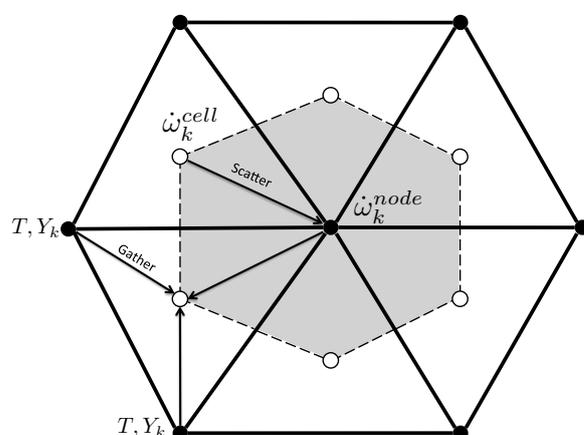


FIGURE H.1 – Illustration de la procédure pour l'évaluation des termes source aux centres des cellules. Les cercles noirs correspondent aux nœuds du maillage, les cercles blancs aux centres des cellules.

L'évaluation des termes sources aux centres des cellules améliore la précision. Cependant, la procédure est plus coûteuse en temps Central Processing Unit (CPU) qu'une évaluation aux nœuds. L'opération de *gather - scatter* est coûteuse, plus particulièrement lorsque le nombre d'espèce est important et/ou lorsque le nombre de réaction est important.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] « A Detailed Chemical Kinetic Model for High Temperature Ethanol Oxidation ». In : (1999).
- [2] T. G. ADAMS. « Torch Ignition for Combustion Control of Lean Mixtures ». In : *SAE technical paper* (1980).
- [3] C. ANGELBERGER et al. « Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames ». In : *Proceedings of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998, p. 61–82.
- [4] W. P. ATTARD, N. FRASER et P. PARSONS. « A turbulent jet ignition pre chamber combustion system for high fuel economy improvements in a modern vehicle powertrain ». In : *SAE technical paper* (2010).
- [5] W. P. ATTARD et P. PARSONS. « A normally aspirated spark initiated combustion system capable of high load high efficiency and near zero NO_x emissions in a modern vehicle powertrain ». In : *SAE technical paper* (2010).
- [6] W. P. ATTARD et P. PARSONS. « Flame kernel development inside a pre chamber of a turbulent jet ignition combustion system in a modern vehicle powertrain ». In : *SAE technical paper* (2010).
- [7] W. P. ATTARD et P. PARSONS. « Ignition energy development for a spark initiated combustion system capable of high load, high efficiency and near zero NO_x emission ». In : *SAE technical paper* (2010).
- [8] A BAGNULO. *Engine with stratified mixture*. US Patent 2,422,610. Juin 1947.
- [9] C BAILLY et G COMTE-BELLOT. *Turbulence*. Sous la dir. de CNRS EDITIONS. CNRS Editions, 2003.
- [10] T BARNES et B.L. T. *Internal combustion engine*. US Patent 3,033,181. Mai 1962.
- [11] M. BAUM et al. « Using Direct Numerical Simulations to study H₂/O₂/N₂ flames with complex chemistry in turbulent flows ». In : *Journal of fluid mechanics* 281 (1994), p. 1–32.
- [12] H. BAYA TODA, K. TRUFFIN et F. NICOUD. « Is the dynamic procedure appropriate for all SGS models? » In : *Fifth European Conference on Computational Fluid Dynamics - ECCOMAS CFD*. Lisbon, Portugal, 14-17 June 2010.
- [13] R. W. BILGER, S. H. STARNER et R. J. KEE. « On reduced mechanisms for methane-air combustion in nonpremixed flames ». In : *Combustion and Flame* 80 (1990), p. 135–149.
- [14] R. B. BIRD, W. E. STEWART et E. N. LIGHFOOT. *Transport phenomena*. New York : John Wiley, 1960.
- [15] D. A. BLANK. « Lean combustion chemical-kinetics studies of an ethanol four stroke radical ignition engine ». In : *SAE technical paper* (2007).
- [16] D. A. BLANK. « Radical controlled autoignition in a HCRI hydrogen DI four stroke engine with reduced heat rejection ». In : *SAE technical paper* (2010).
- [17] A BONHOMME, L SELLE et T POINSOT. « Curvature and confinement effects for flame speed measurements in laminar spherical and cylindrical flames ». In : *Combustion and Flame* (2013).
- [18] R. BOWING, S. PISCHINGER et J. GEIGER. « Ignition systems for highly diluted mixtures in spark ignition engines ». In : *SAE technical paper* (1999).
- [19] W. BRANDSTETTER. « The Volkswagen Lean Burn Pc-Engine Concept ». In : *SAE technical paper* (1979).
- [20] N.O. BRODERSON. *Method of operating internal-combustion engines*. US Patent 2,690,741. Oct. 1954.
- [21] J. BUCKMASTER et G. LUDFORD. *Theory of laminar flames*. Cambridge University Press, 1982.
- [22] S. P. BURKE et T. E. W. SCHUMANN. « Diffusion flames ». In : *Industrial and Engineering Chemistry* 20.10 (1928), p. 998–1005.

Bibliographie

- [23] W. BUSH et F. FENDELL. « Asymptotic analysis of laminar flame propagation for general Lewis numbers ». In : *Combustion science and technology* 1 (1970), p. 421.
- [24] W. K. BUSHE et H. STEINER. « Conditional moment closure for large eddy simulation of nonpremixed turbulent reacting flows ». In : *Physics of Fluids* 11.7 (1999), p. 1896–1906.
- [25] T. D. BUTLER et P. J. O'ROURKE. « A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 16.1 (1977), p. 1503–1515.
- [26] S. M. CANDEL et T. POINSOT. « Flame stretch and the balance equation for the flame surface area ». In : *Combustion science and technology* 70 (1990), p. 1–15.
- [27] CERFACS. *AVBP Handbook* - http://cerfacs.fr/~avbp/AVBP_V5.X/HANDBOOK. CERFACS. 2009.
- [28] M CHAMPION et al. « Spherical Flame Initiation : Theory versus Experiments for Lean Propane-Air Mixtures ». In : (1986).
- [29] F. CHARLETTE, D. VEYNANTE et C. MENEVEAU. « A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part I - non-dynamic formulation and initial tests ». In : *Combustion and Flame* 131 (2002), p. 159–180.
- [30] P. CLAVIN. « Dynamic behavior of premixed flame fronts in laminar and turbulent flows ». In : *Progress in energy and combustion science* 11 (1985), p. 1–59.
- [31] O. COLIN et M. RUDGYARD. « Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations ». In : *Journal of computational physics* 162.2 (2000), p. 338–371.
- [32] O. COLIN et al. *A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion*. Rapp. tech. HEP/123-qed. CERFACS, 1999.
- [33] O. COLIN et al. « A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion ». In : *Physics of Fluids* 12.7 (2000), p. 1843–1863.
- [34] S. COUET, P. HIGELIN et B. MOREAU. « APIR : A New Firing Concept for the Internal Combustion Engines - sensitivity to knock and in-cylinder aerodynamics ». In : *SAE Technical Paper*. SAE International, mai 2001.
- [35] B. CUENOT et T. POINSOT. « Effects of curvature and unsteadiness in diffusion flames. Implications for turbulent diffusion flames ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 25 (1994), p. 1383–1390.
- [36] H J CURRAN et al. « A Comprehensive Modeling Study of iso-Octane Oxidation ». In : *Combustion and Flame* (2002).
- [37] J DALE, M CHECKEL et P SMY. « Application of high energy ignition systems to engines ». In : *Progress in Energy and Combustion Science* (1997).
- [38] J. DALE et A. OPPENHEIM. « Enhanced Ignition for IC Engines with Premixed Gases ». In : *SAE* (1981).
- [39] T. DATE et S. YAGI. « Research and Development of Honda CVCC Engine ». In : *SAE technical paper* (1974).
- [40] J. DEARDORFF. « A numerical study of three-dimensional turbulent channel flow at large Reynolds numbers ». In : *Journal of fluid mechanics* 41 (1970), p. 453–480.
- [41] D.G.GOODWIN. *Cantera C++ Users Guide*. <http://sourceforge.net/projects/cantera>, 2002.
- [42] P. DOMINGO, L. VERVISCH et D. VEYNANTE. « Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow ». In : *Combustion and Flame* 152.3 (2008), p. 415–432.
- [43] C. DOPAZO. « Recent developments in pdf methods ». In : *Turbulent Reacting Flows*. Sous la dir. de P. A. LIBBY et F. A. WILLIAMS. London : Academic, 1994, p. 375–474.
- [44] F DUCHAINE et al. « Coupling heat transfer solvers and large eddy simulations for combustion applications ». In : (2008).

- [45] F DUCHAINE et al. « Development and assessment of a coupled strategy for conjugate heat transfer with Large Eddy Simulation : Application to a cooled turbine blade ». In : *International Journal of Heat and Fluid Flow* (2009).
- [46] F. DUCROS, F. NICOUUD et T. POINSOT. « Wall-Adapating Local eddy-Viscosity models for simulations in complex geometries ». In : *ICFD*. Baines M. J., 1998, p. 293–300.
- [47] H.E. DURLING, R.P. JOHNSTON et K.K. POLIKARPUS. *Torch jet spark plug*. US Patent 5,421,300. Juin 1995.
- [48] H.E. DURLING et J.G. RALPH. *Directed jet spark plug*. US Patent 6,213,085. Avr. 2001.
- [49] L. ELLIOTT et al. « Genetic algorithms for optimisation of chemical kinetics reaction mechanisms ». In : *Progress in Energy and Combustion Science* 30.3 (2004), p. 297–328.
- [50] B ENAUX. « Simulation aux grandes échelles d'un moteur à allumage commandé - Evaluations des variabilités cycliques ». In : (2010).
- [51] B. ENAUX et al. « Large Eddy Simulation of a Motored Single-Cylinder Piston Engine : Numerical Strategies and Validation ». In : t. 86. 2. 2011, p. 153–177.
- [52] B. ENAUX et al. « LES and experimental study of cycle-to-cycle variations in a spark ignition engine ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011), p. 3115–3122.
- [53] B ENAUX et al. « LES study of cycle-to-cycle variations in a spark ignition engine ». In : *PROCEEDINGS OF THE COMBUSTION INSTITUTE* (2011).
- [54] A. ERN et V. GIOVANGIGLI. *Multicomponent Transport Algorithms*. Lecture Notes in Physics. Heidelberg : Springer Verlag, 1994.
- [55] EUROPEAN COMMISSION. « Clean power for transport : a european alternative fuels strategy ». In : (2013).
- [56] EUROPEAN ENVIRONMENT AGENCY. « Annual European Union greenhouse gas inventory 1990-2014 and inventory report 2016 ». In : (2016).
- [57] EUROPEAN STUDY OF COHORTS FOR AIR POLLUTION EFFECTS (ESCAPE). « Articles Air pollution and lung cancer incidence in 17 European cohorts : prospective analyses ». In : *Lancet Oncology* (2013).
- [58] Anne FELDEN. « Development of Analytically Reduced Chemistries (ARC) and applications in Large Eddy Simulations (LES) of turbulent combustion ». Thèse de doct. 2017.
- [59] B. FIORINA, D. VEYNANTE et S. CANDEL. « Modeling combustion chemistry in Large Eddy Simulation of turbulent flames ». In : *Flow, Turbulence and Combustion* 94.1 (déc. 2014), p. 3–42.
- [60] B. FIORINA et al. « A filtered tabulated chemistry model for LES of premixed combustion ». In : *Combustion and Flame* 157 (2010), p. 465–475.
- [61] B. FIORINA et al. « Challenging modeling strategies for LES of non-adiabatic turbulent stratified combustion ». In : *Combustion and Flame* (2014).
- [62] G FONTARAS, N-G ZACHAROF et B CIUFFO. « Fuel consumption and CO₂ emissions from passenger cars in Europe – Laboratory versus real-world emissions ». In : *Progress in Energy and Combustion Science* (2017).
- [63] B. FRANZELLI. « Impact of the chemical description on direct numerical simulations and Large Eddy Simulations of turbulent combustion in industrial aero-engines - TH/CFD/11/101 ». phd. Thèse de doct. Université de Toulouse, France - MeGeP Dynamique des Fluides, 2011.
- [64] B. FRANZELLI, B. FIORINA et N. DARABIHA. « A tabulated chemistry method for spray combustion ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 34.1 (2013), p. 1659–1666.
- [65] B. FRANZELLI et al. « A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames ». In : *Combustion and Flame* 157 (2010), p. 1364–1373.
- [66] T. K. GARRETT. « Porsche stratified charge engine ». In : *Environmental Science and Technology* (1975), p. 826–830.

Bibliographie

- [67] T Ken GARRETT. « Porsche stratified charge engine ». In : *Environmental Science Technology* (1975).
- [68] M. GERMANO et al. « A dynamic subgrid-scale eddy viscosity model ». In : *Physics of Fluids* 3.7 (1991), p. 1760–1765.
- [69] O. GICQUEL, N. DARABIHA et D. THÉVENIN. « Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000), p. 1901–1908.
- [70] David G. GOODWIN. *Cantera Code Site*. Juil. 2009.
- [71] L.A. GOOSSAK. *Method of prechamber-torch ignition in internal combustion engines*. Avr. 1963.
- [72] D GORYNTSEV et al. « Large eddy simulation based analysis of the effects of cycle-to-cycle variations on air-fuel mixing in realistic DISI IC-engines ». In : *PROCEEDINGS OF THE COMBUSTION INSTITUTE* (2009).
- [73] N GOURDAIN et al. « High performance parallel computing of flows in complex geometries : I. Methods ». In : *Computational Science & Discovery* (2009).
- [74] N GOURDAIN et al. « High performance parallel computing of flows in complex geometries : II. Applications ». In : *Computational Science & Discovery* (2009).
- [75] V. GRANET. « La Simulation aux Grandes Echelles : un outil pour la prédiction des variabilités cycliques dans les moteurs à allumage commandé ? » PhD Thesis. Université de Toulouse - Ecole doctorale MEGeP, 2011.
- [76] V GRANET et al. « Large-Eddy Simulation and experimental study of cycle-to-cycle variations of stable and unstable operating points in a spark ignition engine ». In : *Combustion and Flame* (2012).
- [77] V. GRANET et al. « Large-Eddy Simulation and experimental study of cycle-to-cycle variations of stable and unstable operating points in a spark ignition engine ». In : *Combustion and Flame* 159.4 (2012), p. 1562–1575.
- [78] World Bank GROUP. « The Cost of Air Pollution : Strengthening the economic case for action ». In : (2016).
- [79] H.C. GUPTA et V BRACO. « The Origin of Pressure Oscillations in Divided Chamber Engines ». In : *Combustion and Flame* (1982).
- [80] L. A. GUSSAK. « High chemical activity of incomplete combustion products and a method of pre-chamber torch ignition for avalanche activation of combustion in internal combustion engine ». In : *SAE technical paper* (1975).
- [81] L. A. GUSSAK et V. P. KARPOV. « The application of the avalanche activation of combustion process in pre chamber engines ». In : *SAE technical paper* (1979).
- [82] E. R. HAWKES et S. R. CANT. « A flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion ». In : *28th Symp. (Int.) on Combustion*. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2000, p. 51–58.
- [83] R.M. HEINTZ. *Internal combustion engine*. US Patent 2,884,913. Avr. 1959.
- [84] J. O. HINZE. *Turbulence*. New-York : McGraw-Hill, 1975.
- [85] J. HIRSCHFELDER, C. CURTIS et B. BIRD. *Molecular Theory of Gases and Liquids*. 1954^e éd. John Wiley & Sons, 1954.
- [86] David Charles HORNING. *A STUDY OF THE HIGH-TEMPERATURE AUTOIGNITION AND THERMAL DECOMPOSITION OF HYDROCARBONS*. 2001.
- [87] M. IHME et H. PITSCHE. « Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation ». In : *Physics of Fluids* 20.5 (2008).
- [88] H. G. IM, J. H. CHEN et J. Y. CHEN. « Chemical response of methane/air diffusion flames to unsteady strain rate ». In : *Combustion and Flame* 118.1-2 (1999), p. 204–212.

- [89] KAZUO INOUE, HARUO UKAWA et ISAO FUJII. « Fuel Economy and Exhaust Emissions of the Honda CVCC Engine ». In : *Combustion Science and Technology* (2007).
- [90] C J JACHIMOWSKI. « Chemical Kinetic Reaction Mechanism for the Combustion of Propane ». In : *Combustion and Flame* (1984).
- [91] S JERZEMBECK, C GLAWE et N PETERS. « Development and Experimental Evaluation of a High Temperature Mechanism for blended N-Heptane-Isooctane-Ethanol-Air-Mixtures and Gasoline-Ethanol-Air-Mixtures ». In : *Proceedings of the th IASME* (2009).
- [92] S JERZEMBECK et al. « Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation ». In : *Combustion and Flame* (2009).
- [93] G JOMAAS et al. « Experimental determination of counterflow ignition temperatures and laminar flame speeds of C₂-C₃ hydrocarbons at atmospheric and elevated pressures ». In : *PROCEEDINGS OF THE COMBUSTION INSTITUTE* (2005).
- [94] W. P. JONES et V. N. PRASAD. « Large Eddy Simulation of the Sandia Flame Series (D-F) using the Eulerian stochastic field method ». In : *Combustion and Flame* 157.9 (sept. 2010), p. 1621-1636.
- [95] W. P. JONES et V. N. PRASAD. « LES-pdf simulation of a spark ignited turbulent methane jet ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 33.1 (2011), p. 1355-1363.
- [96] M. KETTNER et al. « A new flame jet concept to improve the inflammation of lean burn mixture in spark ignition engines ». In : *SAE technical paper* (2005).
- [97] A. Y. KLIMENKO et R. W. BILGER. « Conditional moment closure for turbulent combustion ». In : *Progress in energy and combustion science* 25.6 (1999), p. 595-687.
- [98] A. KOJIC et al. *Control of auto-ignition timing for combustion in piston engines by prechamber compression ignition*. US Patent 6,953,020. Nov. 2005.
- [99] A. KOJIC et al. *Control of auto-ignition timing for homogeneous combustion jet ignition engines*. US Patent 7,107,964. Sept. 2006.
- [100] A. N. KOLMOGOROV. « The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers ». In : *C. R. Acad. Sci. , USSR* 30 (1941), p. 301.
- [101] M. KUBO, T. NODA et I. HOTTA. *Internal combustion engine with auxiliary combustion chamber*. US Patent 7,204,225. Avr. 2007.
- [102] K. K. KUO. *Principles of combustion*. Hoboken, New Jersey : John Wiley & Sons, Inc., 2005 Second Edition.
- [103] L LABARRERE et al. « Experimental and numerical study of cyclic variations in a Constant Volume Combustion chamber ». In : *Combustion and Flame* (2016).
- [104] G. LACAZE, E. RICHARDSON et T. J. POINSOT. « Large Eddy Simulation of spark ignition in a turbulent methane jet ». In : *Combustion and Flame* 156.6 (2009), p. 1993-2009.
- [105] N. LAMARQUE. « Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère ». PhD Thesis. INP Toulouse, 2007.
- [106] R. LATSCH. « The swirl chamber spark plug : a means of faster, more uniform energy conversion in the spark ignition engine ». In : *SAE technical paper* (1984).
- [107] C. K. LAW. *Combustion physics*. 2006.
- [108] P. D. LAX et B. WENDROFF. « Systems of conservation laws ». In : *Commun. Pure Appl. Math.* 13 (1960), p. 217-237.
- [109] P. D. LAX et B. WENDROFF. « Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy ». In : *Commun. Pure Appl. Math.* 17 (1964), p. 381-398.
- [110] J.-Ph. LÉGIER, T. POINSOT et D. VEYNANTE. « Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion ». In : *Proceedings of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2000, p. 157-168.

Bibliographie

- [111] J.-Ph. LÉGIER et al. « Large eddy simulation of a non-premixed turbulent burner using a dynamically thickened flame model ». In : *IUTAM Symposium on Turbulent Mixing and Combustion*. Sous la dir. d'A. Pollard EDS et S. CANDEL. Kluwer Academic Publishers, 2002, p. 315–326.
- [112] M. LESIEUR, O. MÉTAIS et P. COMTE. *Large-eddy simulations of turbulence*. 2005.
- [113] D. K. LILLY. « A proposed modification of the germano sub-grid closure method ». In : *Physics of Fluids* 4.3 (1992), p. 633–635.
- [114] A. LINAN. « The asymptotic structure of counterflow diffusion flames for large activation energies ». In : 1 (1974), p. 1007.
- [115] T. LOVAS, D. NILSSON et F. MAUSS. « Automatic reduction procedure for chemical mechanisms applied to premixed methane/air flames ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 28.2 (2000), p. 1809–1815.
- [116] T. LOVAS et al. « Comparison of automatic reduction procedures for ignition chemistry ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 29.1 (2002), p. 1387–1393.
- [117] T. LU et C. K. LAW. « A directed relation graph method for mechanism reduction ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 30.1 (2005), p. 1333–1341.
- [118] T. LU et C. K. LAW. « A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species : A reduced mechanism for methane oxidation with NO chemistry ». In : *Combustion and Flame* 154.4 (2008), p. 761–774.
- [119] T. LU et al. « Dynamic stiffness removal for direct numerical simulations ». In : *Combustion and Flame* 156.8 (2009), p. 1542–1551.
- [120] Grant LUMSDEN et Harry C. WATSON. « Optimum Control of an S.I. Engine with a lambda=5 Capability ». In : *SAE Technical Paper*. SAE International, fév. 1995.
- [121] K. LUO et al. « Direct numerical simulations and analysis of three-dimensional n-heptane spray flames in a model swirl combustor ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 33.2 (2011), p. 2143–2152.
- [122] M. MALLORY. *Internal-combustion engine*. US Patent 2,544,605. Mar. 1951.
- [123] R. MALY et M. VOGEL. « Initiation and propagation of flame fronts in lean CH₄-air mixtures by the three modes of the ignition spark ». In : *Symposium (International) on Combustion* 17.1 (1979), p. 821–831.
- [124] M MEHL et al. « An Approach for Formulating Surrogates for Gasoline with Application toward a Reduced Surrogate Mechanism for CFD Engine Modeling ». In : *Energy & Fuels* (2011).
- [125] Antony MISDARIIS, Olivier VERMOREL et T POINSOT. « LES of knocking in engines using dual heat transfer and two-step reduced schemes ». In : *Combustion and Flame* (2015).
- [126] Antony MISDARIIS et al. « Numerical Methods and Turbulence Modeling for LES of Piston Engines : Impact on Flow Motion and Combustion Numerical Methods and Turbulence Modeling for LES of Piston Engines : Impact on Flow Motion and Combustion ». In : (2017).
- [127] V. MOUREAU, B. FIORINA et H. PITSCH. « A level set formulation for premixed combustion LES considering the turbulent flame structure ». In : *Combustion and Flame* 156.4 (2009), p. 801–812.
- [128] S. NAVARRO-MARTINEZ et A. KRONENBURG. « LES-CMC simulations of a lifted methane flame ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 32.1 (2009), p. 1509–1516.
- [129] S. NAVARRO-MARTINEZ, A. KRONENBURG et F. DI MARE. « Conditional moment closure for large eddy simulations ». In : *Flow, Turbulence and Combustion* 75.1-4 (2005), p. 245–274.
- [130] F. NICLOUD et al. « Using singular values to build a subgrid-scale model for Large Eddy Simulations ». In : *Physics of Fluids* 23.8 (2011).
- [131] N. NOGUCHI, S. SANDA et N. NAKAMURA. « Development of Toyota Lean Burn Engine ». In : *SAE technical paper* (1976).

- [132] J. A. van OIJEN, F. A. LAMMERS et L. P. H. de GOEY. « Modeling of premixed laminar flames using flamelet generated manifolds ». In : *Combustion science and technology* 127 (2001), p. 2124–2134.
- [133] A.K. OPPENHEIM, H.E. STEWART et K. HOM. *Pulsed jet combustion generator for premixed charge engines*. US Patent 4,926,818. Juin 1990.
- [134] Vervisch Kljakic P. « Modélisation des oxydes d'azote et des suies dans les moteurs Diesel ». Thèse de doct. EM2C, 2012.
- [135] G. PATNAIK et al. « Detailed numerical simulations of cellular flames ». In : *22nd Symp. (Int.) on Combustion*. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1988, p. 1517–1526.
- [136] William PAYMAN et Richard Vernon WHEELER. « LVI.—The propagation of flame through tubes of small diameter ». In : *J. Chem. Soc., Trans.* (1918).
- [137] F. PECQUERY et al. « Modelling nitrogen oxide emissions in turbulent flames with air dilution : Application to LES of a non-premixed jet-flame ». In : *Combustion and Flame* 161.2 (2014), p. 496–509.
- [138] P. PEPIOT. « Automatic strategies to model transportation fuel surrogates ». Thèse de doct. Stanford University, 2008.
- [139] P. PEPIOT-DESJARDINS et H. PITSCH. « An efficient error-propagation-based reduction method for large chemical kinetic mechanisms ». In : *Combustion and Flame* 154.1-2 (juil. 2008), p. 67–81.
- [140] N. PETERS. « Local quenching due to flame stretch and non-premixed combustion ». In : *Combustion science and technology* 30 (1983), p. 1–17.
- [141] N. PETERS. « Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion ». In : *Progress in energy and combustion science* 10 (1984), p. 319–339.
- [142] N. PETERS. « Laminar flamelet concepts in turbulent combustion ». In : *Symposium (International) on Combustion* 21.1 (1988), p. 1231–1250.
- [143] N. PETERS. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2001, p. 304.
- [144] H. PITSCH. *FlameMaster v3. 1 : A C++ computer program for 0D combustion and 1D laminar flame calculations*. 1998.
- [145] H. PITSCH. « A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion ». In : *Combustion and Flame* 143.4 (2005), p. 587–598.
- [146] H. PITSCH. « Large Eddy Simulation of Turbulent Combustion ». In : *Annual review of fluid mechanics* 38 (2006), p. 453–482.
- [147] T. J. POINSOT, D. VEYNANTE et S. CANDEL. « Diagrams of premixed turbulent combustion based on direct simulation ». In : *23rd Symp. (Int.) on Combustion*. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990, p. 613–619.
- [148] T. POINSOT et D. VEYNANTE. *Theoretical and Numerical Combustion*. Third Edition (www.cerfacs.fr/elearning), 2011.
- [149] S. B. POPE. « Pdf methods for turbulent reactive flows ». In : *Progress in energy and combustion science* 19.11 (1985), p. 119–192.
- [150] S. B. POPE. « Lagrangian PDF Methods for Turbulent Flows ». In : *Annual review of fluid mechanics* (1994), p. 23–63.
- [151] A. POURING et al. *Method for modifying combustion chamber in a reciprocating piston internal combustion engine and resulting engine*. US Patent App. 14/166,654. Juil. 2014.
- [152] F. PROCH et A. M. KEMPF. « Modeling heat loss effects in the large eddy simulation of a model gas turbine combustor with premixed flamelet generated manifolds ». In : *Proceedings of the Combustion Institute* 35.3 (2014), p. 3337–3345.
- [153] Pierre QUILLATRE. « Simulation aux grandes échelles d'explosions en domaine semi-confiné ». In : (2014).

Bibliographie

- [154] H. R. RICARDO. « Recent Work on the Internal Combustion Engine ». In : *SAE Transactions* (1922).
- [155] S. RICHARD, O. VERMOREL et D. VEYNANTE. « Development of LES models based on the flame surface density approach for ignition and combustion in SI engines ». In : *ECCOMAS Thematic Conference on computational combustion*. 2005, p. 1–20.
- [156] R.D. RICHARDSON. *Ignition assisting device for internal combustion engines*. US Patent 5,105,780. Avr. 1992.
- [157] C. ROBINET et al. « A New Firing Concept for Internal Combustion Engines : APIR ». In : *SAE Technical Paper*. SAE International, mar. 1999.
- [158] C. J. RUTLAND et R. S. CANT. « Turbulent transport in premixed flames ». In : *Proceedings of the Summer Program*. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1994, p. 75–94.
- [159] P. SAGAUT. *Large eddy simulation for incompressible flows*. Springer, 2002.
- [160] S. SANDA et N. NAKAMURA. *Internal Combustion Engine Provided with Pre-Combustion Chamber*. US Patent 4048973. 1974.
- [161] L. SELLE et al. « Compressible large eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes ». In : *Combustion and Flame* 137.4 (2004), p. 489–505.
- [162] L. SELLE et al. « Compressible Large-Eddy Simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes ». In : *Combustion and Flame* 137.4 (2004), p. 489–505.
- [163] Nikolai SEMENOV. *Chemical Kinetics and Chain Reactions*. Oxford : Clarendon Press, 1935.
- [164] A SHAH. « Improving the Efficiency of Gas Engines using Pre-chamber Ignition ». Thèse de doct. 2015.
- [165] D T SILVERMAN et al. « The Diesel Exhaust in Miners Study : A Nested Case-Control Study of Lung Cancer and Diesel Exhaust ». In : *JNCI Journal of the National Cancer Institute* (2012).
- [166] J. SMAGORINSKY. « General circulation experiments with the primitive equations : 1. The basic experiment. » In : *Mon. Weather Rev.* 91 (1963), p. 99–164.
- [167] C.E. SUMMERS. *Internal-combustion engine*. US Patent 1,568,638. Jan. 1926.
- [168] M. TANAHASHI et al. « Fine scale structure of H₂-Air turbulent premixed flames ». In : *1st International Symposium on Turbulence and Shear Flow*. Sous la dir. de S. Banerjee EDS et J.EATON. Santa Barbara, Sept 12-15., 1999, p. 59–64.
- [169] Core Writing TEAM. « Climate Change 2014 : synthesis report ». In : (2015).
- [170] H. TENNEKES et J. L. LUMLEY. *A first course in turbulence*. Cambridge : M.I.T. Press, 1972.
- [171] L. THOBOIS, R. LAUVERGNE et T. POINSOT. « Using LES to investigate reacting flow physics in engine design process ». In : *SAE 2007-01-0166* (2007).
- [172] P TIKUISIS. « Rate of formation of carboxyhemoglobin in exercising humans exposed to carbon monoxide ». In : *Defence and Civil Institute of Environmental Medicine* (2002).
- [173] E. TOULSON et J. HAROLD. « A review of prechamber initiated jet ignition combustion systems ». In : *SAE* (2010).
- [174] T. TURANYI, A. S. TOMLIN et M. J. PILLING. « On the error of the quasi-steady-state approximation ». In : *The Journal of Physical Chemistry* 97.1 (1993), p. 163–172.
- [175] M. C. TURKISH. « 3-Valve Stratified Charge Engines : Evolvement, Analysis and Progression ». In : *SAE technical paper* (1974).
- [176] Michael C. TURKISH. « 3 - Valve Stratified Charge Engines : Evolvement, Analysis and Progression ». In : *SAE Technical Paper*. SAE International, fév. 1974.
- [177] UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. « How nitrogen oxides affect the way we live and breathe ». In : (1998).
- [178] OAR Climate Change Division US EPA. « Inventory of U.S. Greenhouse Gas Emissions and Sinks : 1990-2015 – Main Text ». In : (2017).

- [179] C M VAGELOPOULOS et F N ECOLFOPOULOS. « DIRECT EXPERIMENTAL DETERMINATION OF LAMINAR FLAME SPEEDS ». In : *Twenty-Seventh Symposium on Combustion* (1998).
- [180] L. VALINO. « Field Monte Carlo formulation for calculating the probability density function of a single scalar in a turbulent flow ». In : *Flow, Turbulence and Combustion* 60.2 (1998), p. 157–172.
- [181] O. VERMOREL et al. « Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES ». In : *Combustion and Flame* 156.8 (2009), p. 1525–1541.
- [182] D. VEYNANTE et R. KNIKKER. « Comparison between LES results and experimental data in reacting flows ». In : *Journal of turbulence* 7.35 (2006), p. 1–20.
- [183] H.C. WATSON. *Internal combustion engine ignition device*. WO Patent App. PCT/AU1992/000,552. Avr. 1993.
- [184] H.C. WATSON. *Internal combustion engine ignition device*. US Patent 5,611,307. Mar. 1997.
- [185] V. WENG, J. GINDELE et G. TOPFER. « Investigation of the bowl pre chamber ignition concept in a direct injection gasoline engine at part load ». In : *SAE technical paper* (1999).
- [186] Volker WENG et al. « Investigation of the Bowl-Prechamber-Ignition (BPI) Concept in a Direct Injection Gasoline Engine at Part Load ». In : *SAE Technical Paper*. SAE International, oct. 1999.
- [187] F. A. WILLIAMS. *Combustion Theory*. Menlo Park, CA : Benjamin Cummings, 1985.
- [188] P. WOLF et al. « Azimuthal instabilities in annular combustion chambers ». In : *ctrsp*. Sous la dir. de NASA Ames/Stanford Univ. CENTER FOR TURBULENCE RESEARCH. 2010, p. 259–269.
- [189] F. A. WYCZALEK et al. « EFI Prechamber Torch Ignition of Lean Mixtures ». In : *SAE technical paper* (1975).
- [190] S. YAMAGUCHI, N. OHIWA et T. HASEGAWA. « Ignition and Burning Process in a Divided Chamber Bomb ». In : *Combustion and Flame* 59 (1985), p. 177–187.

COLOPHON

This document was typeset using the typographical look-and-feel `classicthesis` developed by André Miede and the high-quality typesetting system \LaTeX . The style was inspired by Robert Bringhurst's seminal book on typography "*The Elements of Typographic Style*".

Final Version as of 19 septembre 2017 (`classicthesis`).