HAL
open science

Approches hybrides combinant chimie complexe, description statistique et densité de surface de flamme pour la simulation aux grandes échelles de l'auto-inflammation, l'allumage par bougie et la flamme de prémélange dans les moteurs à allumage commandé

Guillaume Lecocq

To cite this version:

Guillaume Lecocq. Approches hybrides combinant chimie complexe, description statistique et densité de surface de flamme pour la simulation aux grandes échelles de l'auto-inflammation, l'allumage par bougie et la flamme de prémélange dans les moteurs à allumage commandé. Autre [cond-mat.other]. INSA de Rouen, 2010. Français. NNT : 2010ISAM0007 . tel-00561996

HAL Id: tel-00561996

https://theses.hal.science/tel-00561996v1

Submitted on 2 Feb 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

THESE DE DOCTORAT

présentée par :

Guillaume Lecocq

pour l'obtention du :

GRADE DE DOCTEUR

Formation doctorale : Energétique
Laboratoire d'accueil : IFP, Division Techniques d'Applications Energétiques

Approches hybrides combinant chimie complexe, description statistique et densité de surface de flamme pour la simulation aux grandes échelles de l'auto-inflammation, l'allumage par bougie et la flamme de prémélange dans les moteurs à allumage commandé

Soutenue le 25 mars 2010

Composition du jury :

Michel Champion	Rapporteur	Directeur de recherche au CNRS
Denis Veynante	Rapporteur	Directeur de recherche au CNRS
Thierry Poinsot	Examinateur	Directeur de recherche au CNRS
Olivier Gicquel	Examinateur	Professeur à l'Ecole Centrale Paris
Laurent Duchamp De Lageneste	Examinateur	Ingénieur de recherche PSA
Luc Vervisch	Examinateur	Professeur à l'INSA de Rouen
Stéphane Richard	Examinateur	Ingénieur de recherche IFP
Olivier Colin	Examinateur	Ingénieur de recherche IFP

Résumé

Les travaux réalisés lors de cette thèse ont visé la proposition de modélisations aussi génériques que possibles pour rendre compte de la combustion dans les moteurs automobiles dans un cadre de la Simulation aux Grandes Echelles (SGE ou LES en anglais). Dans la littérature, le modèle PCM-FPI apparait comme une base de départ intéressante puisqu'il a permis d'aborder tous les modes de combustion rencontrés dans les moteurs automobiles (allumage par bougie, flamme de prémélange, auto-inflammation en milieu stratifié en richesse). Ce modèle repose sur des calculs préalables de flammes laminaires intégrant les effets de chimie complexe et une modélisation des effets de la turbulence sur la flamme laminaire au travers de fonctions densités de probabilité. Néanmoins, des inconvénients sont liés à ce formalisme, ainsi ne permet-il pas de contrôler la vitesse de propagation du front de flamme turbulent. Parmi les modèles intégrant au contraire cette caractéristique, la modélisation basée sur la résolution d'une équation de transport pour la densité de surface de flamme (modèle ECFM-LES) se détache, celle-ci ayant déjà été utilisée lors de SGE de cycles d'un moteur à allumage commandé. Les travaux de thèse traitent tout d'abord la problématique de la fermeture du terme de transport turbulent pour la flamme de prémélange. Les fermetures disponibles dans la littérature pour ce terme sont évaluées à partir d'analyses de résultats de simulations numériques directes puis de SGE d'un brûleur de laboratoire. Des couplages entre les modèles PCM-FPI et ECFM-LES ont été proposés (modèles PCM-CFM I et II) pour la flamme de prémélange et leurs capacités de prédiction de la chimie et du positionnement du front de flamme turbulent ont été validées par des SGE du même brûleur. Afin de rendre utilisable, lors de calculs moteurs, les modèles proposés, ceux-ci ont été couplés à un sous-modèle de la littérature spécifique à l'allumage par bougie. Des tests de validation ont été menés par calculs d'une expérience de laboratoire. Celle-ci proposait des mesures temporelles de rayons caractéristiques d'un noyau de gaz brûlés créé par allumage par bougie dans un milieu turbulent. Par la suite, les modèles PCM-CFM I et II ont été étendus (donnant ainsi respectivement les modèles I et II) par l'intégration à chacun d'un modèle d'auto-inflammation (respectivement TKI et PCM-FPI). Les propositions ont prouvé leur fonctionnalité et leur capacité qualitative de traitement de la transition "combustion en auto-inflammation" vers l'établissement et la propagation d'une flamme de prémélange ainsi que sa réciproque. Les deux modes sont caractéristiques des combustions anormales pouvant être rencontrées dans les moteurs à allumage commandé (pré-allumage et cliquetis). Le volet théorique des travaux s'achève alors par la proposition de prolongements aux modèles proposés pour tenir compte des effets de stratification de sous-maille. Enfin, une dernière partie a prouvé le potentiel qualitatif de l'utilisation des modèles I et II pour l'investigation des combustions anormales par des SGE en configuration moteur.

Mot-clés : Simulation aux Grandes Echelles, combustion, turbulence, PCM-FPI, ECFM-LES, TKI, calculs moteurs, combustions anormales.

Summary

The works performed during this thesis aimed at proposing models as generic as possible that account for combustion in automotive engines in the context of Large-Eddy Simulation (LES). In the literature, the PCM-FPI model appears as an interesting basis because it enabled to address all combustion modes encountered in automotive engines (spark-ignition, premixed flame, auto-ignition for stratified equivalence ratio conditions). This model relies on preliminary calculations of laminar flames integrating detailed chemistry effects and the modeling of turbulence effects on the laminar flame through probability density functions. Nevertheless, drawbacks are linked to this formalism, thus it does not enable to control the propagating speed of the turbulent flame front. Among the models that, on the contrary, integrate this characteristic, the modeling based on the resolution of a transport equation for the flame surface density (ECFM-LES model) seems attractive, this former having been already used for LES of several cycles of a Spark-Ignition (SI) engine. The thesis works firstly address the problématique of the closure of the turbulent transport term for the premixed flame. The closures available in the literature for this term are evaluated from analysis of direct numerical simulations results then from LES of a laboratory burner. Couplings between the models PCM-FPI and ECFM-LES have been proposed (models PCM-CFM I and II) for the premixed flame and their prediction abilities of the chemistry and of the flame front location have been validated through LES of the same burner. In order to make usable the proposed models for engine calculations, these former have been coupled to a submodel of the literature specific to spark-ignition. Validating test cases have been performed through calculations of a laboratory experience. It proposed temporal measurements of characteristic radii of a burned gases kernel created by spark-ignition a turbulent environment. Then, the models PCM-CFM I and II have been extended (thus giving respectively the models I and II) in integrating for each a model of auto-ignition (respectively TKI and PCM-FPI). These propositions proved their functionality and their qualitative ability of addressing the transition auto-ignition combustion towards the creation and the propagation of a premixed flame as well as the reverse transition. Both modes are characteristic of abnormal combustions that can be encountered in SI engines (pre-ignition and knock). The theoretical part of the works ends with the proposition of continuations for proposed models in order to account for equivalence ratio stratification effects at the sub-grid scale. Finally, a last part highlighted the qualitative potential of the use of models I and II for the investigation of abnormal combustions in SI engines by LES.

Keywords : Large-Eddy Simulation, combustion, turbulence, PCM-FPI, ECFM-LES, TKI, engine computations, abnormal combustions.

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier mes encadrants. Tout d'abord Luc Vervisch, pour m'avoir aiguillé vers ce sujet de thèse et pour s'être impliqué dans le sujet, particulièrement au moment de la rédaction des papiers et du manuscrit. Merci également à Olivier Colin qui m'a encadré à l'IFP la première année de thèse et dont les idées ont permis la proposition du coeur des modèles abordés dans la thèse. Enfin, merci à Stéphane Richard, qui a tenu le pari d'encadrer jusqu'au bout une thèse entamée et dont il n'avait pas défini lui-même le sujet. Merci pour son immense disponibilité et du coeur constant qu'il a mis dans sa tâche d'encadrant, du moment où il a récupéré le sujet jusqu'à la dernière minute de la soutenance. Sans nul doute, la production en papiers lors de la thèse n'aurait pas été aussi riche sans sa grande implication.

Je souhaiterais également remercier les membres de mon jury pour avoir accepté d'évaluer mon travail ainsi que pour leurs questions et commentaires lors de la soutenance. Merci à Michel Champion et Denis Veynante pour leur analyse soigneuse du manuscrit de thèse et leur rapport. Je remercie également Olivier Gicquel qui a tenu la présidence du jury et les examinateurs Thierry Poinsot, Laurent Duchamp De Lageneste, Olivier Colin et Stéphane Richard pour l'attention portée à mon travail. J'ai été très honoré de la présence de telles personnalités du monde de la recherche scientifique au sein de mon jury.

Cette thèse s'étant déroulée à temps plein dans les locaux de l'IFP, je remercie Stéphane Henriot et Antonio Pires da Cruz qui tour à tour m'accueillirent au sein de leur département et mirent à ma disposition tous les moyens indispensables à la bonne réalisation de mes travaux.
Merci également aux ingénieurs du département. Je crois que j'ai intéragi avec chacun, pour des questions techniques ou non. Pour une question technique posée, j'avais accès à la réponse agrémentée de riches compléments. Je tiens aussi à les remercier pour leur chaleur et leur sympathie, qui contribuèrent à me mettre dans le meilleur état d'esprit pour la réalisation de ma thèse. Je me souviens également de bons moments composés par des courses à pied le midi (dont l'efficacité est redoutable pour sortir temporairement de son esprit des résultats de calcul ou même des absences de résultats), le Cross IFP 2007 lors duquel l'honneur m'a été fait d'intégrer l'équipe, à la fois historique et prestigieuse des "Six Mules Moteur" (avec Olivier, Jörg, François et Stéphane ... je me rappelle seulement maintenant que ce dernier m'avait dépassé 200m avant la ligne d'arrivée...), ainsi que le Marathon Relais des Yvelines (avec de nouveau François et Stéphane ... quel final !).

J'ai rencontré au cours de ces trois années de nombreux thésards. Commençons par les anciens. Merci à Jérémy, que j'ai harassé de questions pendant la première année, lui finissant ses travaux mais se montrant toujours disponible pour répondre à mes interrogations. Un merci spécial à Jean-Baptiste, que j'ai appris à connaître progressivement, celui-ci allant jusqu'à se transformer à la fin de ma thèse en "coach mental et sportif" de ma personne. Merci pour le soutien apporté particulièrement lors de la dernière ligne droite, lors de laquelle tout se bouscule (interrogations sur les perspectives, manuscrit à rédiger et ensuite préparation de la soutenance). Je tiens à saluer mes premiers co-bureaux : Lionel, Jörg et Neil avec qui j'ai vécu la majeure partie de ma thèse. Je me remémore avec plaisir ces longues plages de concentration suivies de nécessaires extériorisations des tensions à

travers des expressions de la fantaisie la plus débridée (même s'il fut assez difficile de venir à bout du flegme britannique).
Je pense ensuite aux plus jeunes, encore en activité de doctorant, avec qui j'ai partagé un autre bureau (un peu plus grand) : Francis, Vahid, Gopalkrishnan(etc...), Aymeric, Damien, Julien, Pauline, Kirsten, Zakaria, Hubert, Guillaume, Sabre et Yohan. Je salue également Alessio, le premier de notre "promotion" de thésards à en avoir fini avec sa thèse.
J'ai toujours bénéficié de l'excellent état d'esprit qui régnait chez les thésards, tant au travers d'indispensables réponses à des questions techniques que du soutien moral que je pouvais trouver chez certains. Je souhaite à ceux encore en piste de réaliser d'excellents travaux de thèse.
Enfin, j'ai passé avec certains thésards des moments particulièrement mémorables en dehors du contexte de travail, merci à eux pour cela.

Un merci un peu particulier car il s'adresse à des gens qui ne liront certainement jamais ce document. Merci aux tireurs du club de Boxe Française de Viroflay. J'ai pu m'épanouir dans cette activité et rencontrer des personnes formidables à un moment de la thèse où les absences de résultats alternaient avec les périodes de doute.

Merci à Fila pour avoir procédé à une ultime relecture du manuscrit.

Enfin merci aux membres de ma famille qui, me revoyant certains week-ends, faisaient parfois les frais de tensions accumulées durant la semaine. Merci pour leur patience et leur compréhension.

“you can’t start a fire, you can’t start a fire without spark”
Amy MacDonald, reprenant *Dancing in the dark* de Bruce Springsteen.

“Nooooooooooooooooooooooooon !”
Non, ami lecteur, il ne s’agit pas d’un héros d’une saga spatiale découvrant avec horreur un lien de parenté avec son ennemi de toujours. Il s’agit plus simplement de la réaction d’une solide connaissance de l’auteur, réalisant qu’elle avait reproduit, en introduisant du gazole à la place de l’essence dans le réservoir de son propre véhicule, les conditions des calculs du chapitre 7 ...

Table des matières

Introduction **7**

1 Modélisation de la combustion **17**

1.1 Introduction à quelques notions liées à la combustion 18

1.1.1 Equations de l'aérothermochimie 18

1.1.2 Modes de combustion élémentaires en régime laminaire 19

Flamme prémélangée 19

Combustion non prémélangée 20

Combustion en milieu partiellement prémélangé 20

1.2 Introduction à la LES 22

1.2.1 Formalisme 22

1.2.2 Mise en équation de la LES dans le solveur AVBP 22

1.3 Modélisation de la combustion 24

1.3.1 Modélisation de la combustion en LES 25

Approches décrivant l'évolution d'une interface 25

Modèles à épaississement de flamme 27

Modélisations statistiques 28

Couplages de modèles "mono-mode" pour la modélisation de combustions mixtes 30

Synthèse des modèles LES 32

1.3.2 Tabulation de la chimie 33

1.3.3 Modèles génériques existants pour la simulation moteur 34

Moteur à allumage commandé 34

Moteur Diesel 35

Moteur à allumage commandé et injection directe / Diesel 37

1.4 Choix de modélisation 39

1.5 Conclusion 41

2 Fermeture du transport non résolu pour les flammes prémélangées en LES **43**

2.1 Abstract 43

2.2 Introduction 44
2.3 Filtered progress variable transport equation 44
2.4 Models for the turbulent transport 45
2.4.1 RANS formulation 45
2.4.2 LES formulation 46
2.5 Flame surface density modelling 47
2.6 *A priori* comparisons 48
2.7 LES of a lean premixed turbulent swirl-burner 50
2.7.1 Experimental set-up 50
2.7.2 Results 51
2.8 Conclusion 56

3 Modélisation de la flamme turbulente prémélangée 57
3.1 PCM-FPI pour la modélisation de la flamme de prémélange 57
3.2 Modélisations alternatives basées sur des pdf présumées bimodales 61
3.2.1 Fermeture algébrique 62
3.2.2 Fermeture dynamique 65
3.3 Formulations de nouveaux modèles pour le prémélange 65
3.3.1 Couplage fort (modèle PCM-CFM I) 65
3.3.2 Couplage faible (modèle PCM-CFM II) 66
3.4 Proposition et étude de nouveaux formalismes 66
3.5 Introduction 67
3.6 Hybrid approaches for LES of turbulent premixed flames combining complex chemistry and flame surface density concept 68
3.6.1 LES models based on flame surface density 68
Algebraic closure for the FSD 69
Transport equation for the flame surface density : the ECFM-LES model 69
Chemistry for FSD models 70
Prediction of the turbulent flame speed 70
3.6.2 Flamelet with presumed pdf (PCM-FPI) 72
Premixed flamelet chemistry tabulation (FPI-FGM) 72
Presumed pdf as LES filters 72
Expression of the flame speed for PCM-FPI models 73
3.6.3 Hybrid presumed pdf and flame surface density closures 76
Strong coupling approach 77
Weak coupling approach 80
3.7 LES of a turbulent fuel-lean premixed burner : the PRECCINSTA experiment 82

3.7.1 Experimental setup description . . . 82
3.7.2 Numerical approach . . . 83
3.7.3 Simulations . . . 83
Definition of the runs . . . 83
Hybrid models simulations . . . 84
Comparison with PCM-FPI . . . 89
3.8 Concluding remarks . . . 91
3.9 Conclusion . . . 93

4 Allumage par bougie 95
4.1 Introduction . . . 95
4.2 Modeling spark-ignition . . . 96
4.2.1 AKTIM-LES . . . 96
4.2.2 Coupling procedure for PCM-CFM I and II . . . 97
4.2.3 Modeling ignition with PCM-FPI . . . 98
4.3 Canonical test cases . . . 99
4.3.1 Principle and objectives . . . 99
4.3.2 Numerical setup . . . 99
4.3.3 Results . . . 100
4.4 Simulation of a laboratory spark-ignited experiment . . . 101
4.4.1 Experimental configuration . . . 101
4.4.2 Numerical setup . . . 101
4.4.3 Results . . . 104
4.5 Flame kernel development in highly turbulent flows . . . 109
4.5.1 Definition of the numerical configuration . . . 109
4.5.2 Simulation results . . . 109
4.6 Concluding remarks . . . 110
4.7 Conclusion . . . 114

5 Modélisations de transitions entre auto-inflammation et flamme de prémélange 115
5.1 Généralisation des modèles proposés . . . 115
5.1.1 Modèle I . . . 115
5.1.2 Modèle II . . . 118
Détermination de la ségrégation locale . . . 119
Détermination du facteur α . . . 120
Cohérence entre les taux de réaction . . . 121
Approximations liées à l'application au calcul moteur . . . 122
5.2 Cas tests monodimensionnels . . . 122
5.2.1 Principe des calculs . . . 123

Cas du pré-allumage 124
Cas cliquetis 124
5.2.2 Résultats 124
Cas du pré-allumage 124
Cas cliquetis 126
5.3 Conclusion 129

6 Extension des modèles aux modes de combustion stratifiés 131
6.1 Extensions du modèle I 131
6.1.1 Modélisation des effets des stratifications en richesse de sous-maille pour la partie propagative 131
6.1.2 Modélisation des effets de la stratification pour la modélisation de l'auto-inflammation 133
Intégration de la pdf en fraction de mélange à la modélisation TKI : TKI-pdf 133
Intégration des effets diffusifs liés à la stratification : modèle mixte TKI-pdf/ADF-PCM 133
6.1.3 Intégration de la combustion en flamme de diffusion 135
ADF-PCM et indice de flamme 135
6.2 Application d'une pdf en fraction de mélange pour le modèle II 137
6.3 Conclusion 138

7 Simulations de cas moteur 139
7.1 Cas test 139
7.1.1 Configuration 139
7.1.2 Initialisation et conditions aux limites 139
7.1.3 Maillage mobile 141
7.1.4 Modèle de combustion et table chimique 141
7.1.5 Points de fonctionnement étudiés et phénoménologie 143
7.2 Résultats 144
7.2.1 Cliquetis 144
7.2.2 Pré-allumage 150
Cas $\Delta T^u = 200\ K$ 150
Cas $\Delta T^u = 500\ K$ 152
7.3 Conclusion 157

Conclusions et perspectives 159

Bibliographie 163

Introduction

Contexte

Des réglementations de plus en plus drastiques en termes d'émissions de polluants motivent les industriels à optimiser les systèmes intégrant la combustion d'hydrocarbures, voire à développer de nouveaux concepts. Ceci peut être illustré par le cas du secteur automobile pour lequel les normes en Europe, aux Etats-Unis et au Japon abaissent progressivement les seuils autorisés pour les émissions d'hydrocarbures imbrûlés (HC), d'oxydes d'azote (NO_x), de monoxyde de carbone (CO) et de particules (PM). Cette tendance est visible sur le tableau 1, dans lequel figurent les seuils chronologiquement imposés par l'Union européenne pour les moteurs essence.

Norme	Euro 1 (1993)	Euro 2 (1996)	Euro 3 (2000)	Euro 4 (2005)	Euro 5 (2009)	Euro 6 (2014)
Oxydes d'azote (NO_x)	-	-	150	80	60	60
Monoxyde de carbone (CO)	2720	2200	2200	1000	1000	1000
Hydrocarbures (HC)	-	-	200	100	100	100
Particules (PM)	-	-	-	-	5(*)	5(*)
Hydrocarbures non méthaniques ($HCNM$)	-	-	-	-	68	68

Tab. 1 – Résumé des seuils autorisés par les différentes normes Euro en mg/km pour les véhicules essence ou fonctionnant au gaz de pétrole liquéfié (GPL) ou au gaz naturel de ville (GNV). Les données pour lesquelles figurent une étoile correspondent aux moteurs à injection directe fonctionnant en mélange pauvre.

L'attention du législateur se porte également sur la consommation de combustible et donc sur les émissions en CO_2, qui sont en constante croissance comme l'atteste la figure 1. Bien que n'étant pas considéré comme un polluant, le CO_2 reste un des principaux gaz à effet de serre et l'augmentation de sa teneur dans l'atmosphère du fait des activités humaines semble contribuer au réchauffement climatique. D'autre part, une partie du CO_2 émis est absorbé par les océans, entraînant leur acidification et affectant l'écosystème marin. Des techniques de captage de cette espèce chimique sont en cours de développement pour des installations industrielles. Cependant, pour les véhicules, aucun système de post-traitement n'existe pour le CO_2, aussi les réductions d'émissions sont-elles principalement obtenues par une diminution de la consommation en carburant. L'achat de véhicules économes est d'ailleurs encouragé par le gouvernement français au travers d'un système de bonus/malus écologiques se répercutant sur leur prix de vente.

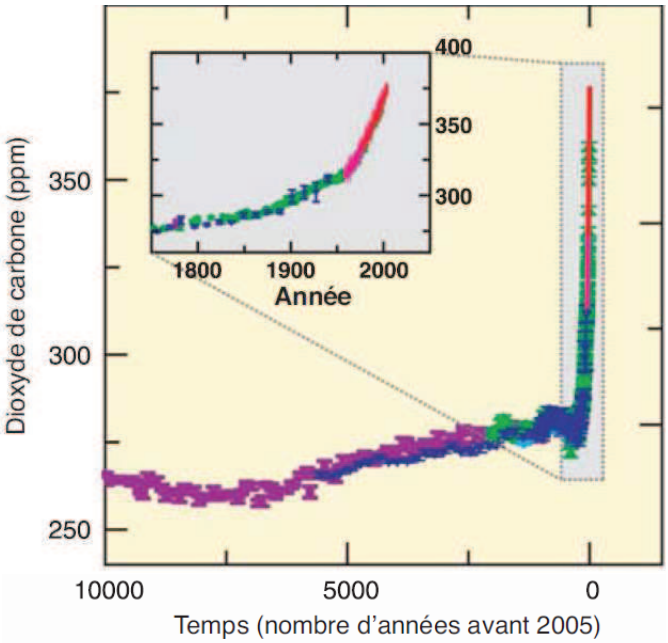


FIG. 1 – Concentration atmosphérique de CO_2 durant les 10 000 dernières années. Les mesures proviennent de carottes de glace (symboles de diverses couleurs pour diverses études) et d'échantillons atmosphériques (ligne rouge). Tiré d'un rapport du Groupe d'experts intergouvernemental sur l'évolution du climat (GIEC) [38].

Afin d'atteindre les niveaux de polluants imposés, une compréhension fine des mécanismes mis en jeu lors de la combustion est requise, celle-ci étant d'autant plus ardue sur les moteurs exploitant de nouvelles technologies. Dans cette optique, la simulation numérique complète les campagnes d'essais conventionnelles puisqu'elle donne accès à des grandeurs physiques parfois difficilement mesurables et s'avère moins coûteuse. Le présent travail de thèse s'inscrit dans une démarche globale d'amélioration de ces outils en ciblant l'intégration dans les modèles d'effets physiques liés au procédé de combustion. Dans ce qui suit, sont tout d'abord présentées les solutions techniques proposées par le monde de la recherche visant une réduction des émissions polluantes et des gaz à effet de serre des moteurs à combustion interne, puis l'apport concret de la simulation numérique pour ces applications.

Nouvelles technologies pour les moteurs automobiles

Motorisation Diesel

Les motorisations Diesel sont connues pour leur haut niveau de rendement, comparativement aux moteurs essence (entre 20 et 25 % d'économie par rapport à un moteur de même puissance), mais aussi pour leurs émissions élevées en NO_x et particules. Dans ce cas, la combustion débute en auto-inflammation dans un milieu hétérogène en richesse pour de hautes pressions et températures. Les hautes températures atteintes pendant la combustion vont promouvoir la formation de NO_x tandis que la combustion dans des milieux localement riches va favoriser l'apparition de suies comme montré sur le diagramme

de Pischinger (figure 2).

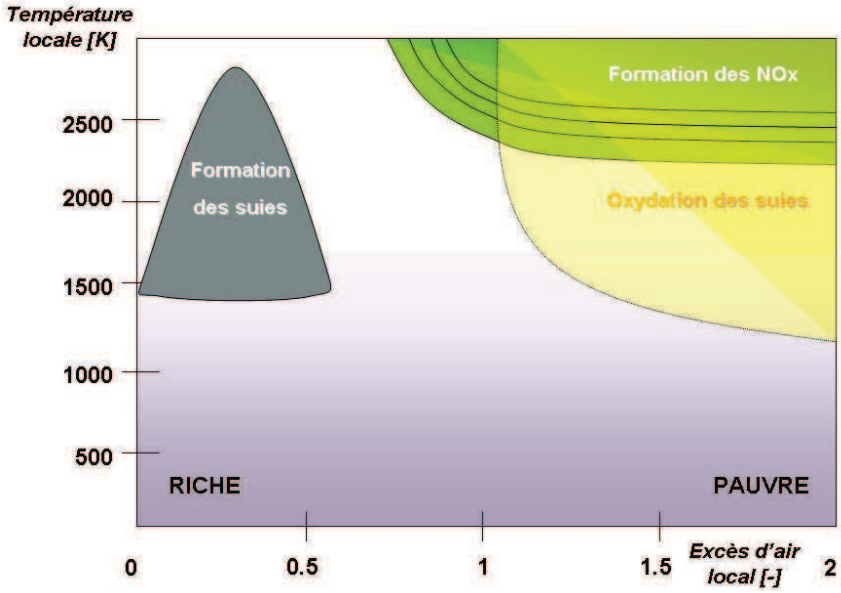


FIG. 2 – Diagramme de Pischinger.

Afin de satisfaire la norme Euro 6, la dépollution s'avèrera relativement coûteuse puisque la ligne d'échappement devra intégrer diverses technologies permettant la conversion du CO, des HC, des suies (filtre à particule) et des NO_x (SCR ou piège à NO_x). Néanmoins, il est possible que ces technologies ne soient pas suffisantes à terme et qu'il soit également nécessaire de réduire les émissions dès la chambre de combustion. Une première solution technique simple, présente sur de nombreux véhicules actuels, consiste à faire recirculer les gaz brûlés issus du cycle précédent (EGR : *Exhaust Gaz Recirculation* en anglais) vers l'admission pour diluer la charge et ainsi abaisser la température de flamme. Il est également possible d'optimiser les stratégies d'injection en variant l'avance à l'injection ainsi que leur nombre. La technologie HCCI (*Homogenous Charge Compression Ignition*) se pose comme une autre alternative et a été investiguée tant par des campagnes d'essais qu'au moyen de l'outil numérique. Ce concept correspond à la compression et l'auto-inflammation d'un mélange homogène, la combustion étant alors pilotée par les conditions thermodynamiques de la chambre. Le contrôle très délicat est réalisé *via* un jeu sur l'avance à l'injection du carburant et sur les taux d'EGR présents. La combustion HCCI a fourni expérimentalement des émissions très faibles de NO_x et de suies, néanmoins son exploitation reste problématique du fait du bruit généré par l'auto-inflammation en masse et des difficultés de contrôle de la combustion.

Motorisation essence

La chaîne "moteur essence/catalyse à trois voies" fournit un ensemble peu polluant : la combustion se déroule dans un milieu homogène de richesse unitaire, ce qui permet simultanément dans le catalyseur les réactions d'oxydation (CO vers CO_2, HC vers CO_2 et H_2O) et de réduction (NO_x vers N_2). Les améliorations restent donc à porter sur le rendement du moteur. Ce dernier est en premier lieu bridé par le taux de compression maximal

(dimensionné pour réduire l'apparition du cliquetis), et, en second lieu par les pertes par vannage liées à la présence du papillon d'admission d'air. Ce phénomène est prépondérant aux faibles et moyennes charges pour lesquelles l'obturation du conduit par le papillon est significative. Parmi les perspectives attrayantes pour répondre à cette problématique, quelques techniques sont notables :

- des stratégies de contrôle de la hauteur de levée des soupapes permettant de se substituer au moins en partie au papillon pour le contrôle du volume d'air admis ($Variable\ Valve\ Lift$: VVL) ;

- la désactivation de cylindres à faible charge qui permet d'optimiser le remplissage des cylindres fournissant le couple moteur ;

- le *downsizing* qui correspond à une réduction de la cylindrée du moteur afin de favoriser le remplissage des cylindres. Couplé à une suralimentation, ce concept permet finalement d'augmenter le rendement tout en conservant une puissance spécifique importante. Dans les moteurs suralimentés, une auto-inflammation non désirée et portant le nom de *rumble* peut se produire avant l'allumage. L'origine exacte de ce phénomène n'est pas encore complétement caractérisée ;

- l'injection à haute pression du carburant directement dans la chambre de combustion. L'évaporation du spray refroidit la charge permettant de repousser l'apparition du cliquetis et d'exploiter des taux de compression plus élevés soit un meilleur rendement. Ces effets résultent en une baisse de la consommation de carburant (des gains potentiels de 10 à 15 % sont attendus) et une augmentation de la puissance du moteur. Les émissions d'imbrûlés sont également réduites lors des régimes transitoires, du fait de la disparition d'une inertie liée à un système d'injection amont. L'injection directe peut-être couplée à d'autres modes de combustion :

  - une combustion se déroulant en milieu stratifié.
    Avec l'injection directe, le papillon contrôlant le débit d'air a disparu. A de faibles charges, peu de carburant est injecté, par conséquent la richesse globale dans la chambre est trop faible pour que la combustion puisse se dérouler. Dans ce cas, l'injection est réalisée suffisamment tard au cours du cycle pour que la répartition du mélange air/carburant soit stratifiée au moment de l'allumage et que la richesse à proximité de la bougie soit proche de la stœchiométrie. La charge augmentant, l'injection devient suffisamment précoce pour que la combustion se produise en milieu homogène pauvre puis stœchiométrique.

  - la technologie CAI qui est similaire au mode HCCI pour les moteurs Diesel et qui serait aussi exploitée à de faibles niveaux de charge. Là encore la combustion en régime pauvre et en milieu dilué par des gaz brûlés non recirculés permet de faibles émissions de NO_x, d'imbrûlés et de CO. L'inconvénient étant qu'un système de post-traitement doit être ajouté pour parvenir aux niveaux imposés par la législation. Rappelons qu'en effet la catalyse à trois voies présente classiquement sur les moteurs essence ne fonctionne qu'à la stœchiométrie. D'autre part, comme en HCCI, la combustion en masse génère d'importants niveaux de bruit peu aisés à limiter.

L'utilisation de modes de combustion et de technologies innovants présentés se heurtent toutefois à de nombreuses difficultés, notamment liées au fait que la compréhension de tous les phénomènes physiques mis en jeu est difficile. Néanmoins, des progrès sont réalisés grâce à des efforts de modélisation de la physique et de simulations, comme cela est détaillé dans la suite.

Apport de la simulation tridimensionnelle des écoulements

En raison de l'augmentation des puissances de calculs fournies par les machines et de son coût modéré en comparaison des campagnes d'essais, la simulation numérique des écoulements (ou CFD : *Computational Fluid Dynamics* en anglais) s'est fortement développée en quelques dizaines d'années. Elle permet maintenant d'assister efficacement la conception des nouvelles technologies moteurs comme le montre le travail de revue récent mené par Drake et Haworth [44] pour des cas d'études de moteurs essence à injection directe et HCCI. Ainsi la CFD a-t-elle permis la modélisation des caractéristiques des sprays et le traitement des émissions des imbrûlés pour les moteurs à injection directe intégrant un guidage du spray par le piston. D'autre part, la CFD a aussi été exploitée pour des études dédiées à la combustion comme par exemple le mode CAI [81] et les combustions anormalement rapides sur une motorisation du type *downsizing* [132].

Les écoulements dans les applications industrielles sont caractérisés par leur niveau de turbulence. Afin de décrire théoriquement ce phénomène, Kolmogorov [84] a proposé une distribution de l'énergie des tourbillons turbulents en fonction de leur taille (figure 3) : une gamme continue d'échelles est décrite, présentant une cascade d'énergie des plus grandes vers les plus petites. Le spectre représente physiquement une division des tourbillons de plus grande échelle en des tourbillons d'échelle caractéristique inférieure en même temps qu'une transmission de leur énergie. La gamme d'échelles turbulentes est comprise entre l'échelle intégrale l_T déterminée par la géométrie du domaine d'étude et l'échelle de Kolmogorov, où l'énergie turbulente est dissipée sous forme de chaleur. Trois types de modélisations de la turbulence existent, chacune correspondant à un niveau de résolution du spectre :

- DNS (pour *Direct Numerical Simulation*) : dans ce cas toutes les échelles de la turbulence sont résolues et les tailles des mailles sont alors nécessairement voisines de l'échelle de Kolmogorov (soit la taille caractéristique de la plus petite structure tourbillonnaire). Les maillages destinés à des DNS requièrent ainsi un nombre de points très important. De plus, les simulations nécessitent une discrétisation des équations régissant la physique des écoulements par des schémas numériques très précis. L'ensemble s'avère donc globalement onéreux et lourd à mettre en oeuvre pour une utilisation industrielle.

- RANS (pour *Reynolds-Averaged Navier-Stokes*) : les équations de transport de la quantité de mouvement, de la continuité et des variables relatives à la combustion sont moyennées, tout le spectre de la turbulence est ainsi modélisé. Les modélisations RANS

sont très répandues dans l'industrie de par leur robustesse et des temps de calculs relativement courts.

– LES (pour *Large-Eddy Simulation*) : cette approche est assimilable à un compromis entre les deux précédentes. Elle est basée sur une coupure à une échelle k_c dans la zone inertielle du spectre turbulent : les structures turbulentes de dimension supérieure à $2\pi/k_c$ sont résolues, tandis que les plus petites sont modélisées.

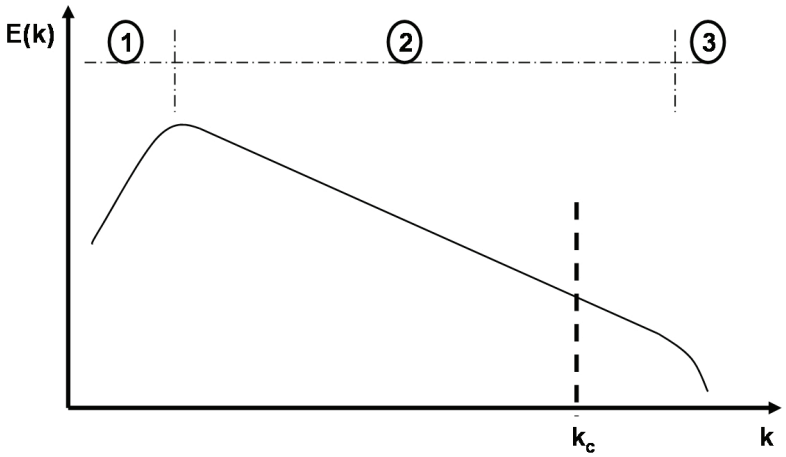


Fig. 3 – Représentation schématique du spectre énergétique de la turbulence. Région 1 : échelles les plus énergétiques. Région 2 : zone inertielle du spectre turbulent. Région 3 : zone de dissipation de l'énergie turbulente.

LES et calcul moteur

Les calculs RANS, couramment exploités par l'ingénierie, ont comme gros avantage une rapidité d'exécution. En effet, un résultat RANS ne représente qu'un cycle moyen et ne requiert que le calcul d'un ou deux cycles pour assurer la convergence du calcul. La LES pour sa part est plus onéreuse en ressources de calcul mais son formalisme permet *a priori* de résoudre directement les mouvements turbulents instationnaires à grande échelle rencontrés dans les moteurs. Les variabilités cycle à cycle de ces phénomènes impactent notamment la propagation locale du front de flamme, la formation du mélange dans le cas d'injections directes du carburant dans la chambre et la fiabilité de l'allumage, étant donné que les mouvements turbulents pilotent la position de la zone de mélange inflammable par rapport à la bougie. De plus, les auto-inflammations aléatoires indésirables comme le cliquetis ou le *rumble* sont des phénomènes dépendant des conditions thermodynamiques locales donc indirectement des effets de l'aérodynamique qui doit être calculée aussi précisément que possible. La LES permet donc potentiellement des investigations beaucoup plus efficaces qu'avec une approche RANS.
L'exploitation du couple LES/calculateur massivement parallèle a déjà permis d'étudier sur des domaines de calculs importants des phénomènes physiques complexes comme les instabilités thermo-acoustiques [136] et les ratés d'allumage [13]. Néanmoins, comparativement aux modélisation RANS, l'utilisation de la LES pour la réalisation de calculs

moteur est très récente. Des calculs d'aérodynamique pure ont été réalisés pour des configurations académiques [149] et plusieurs cycles moteur consécutifs [49], afin de caractériser précisément l'apport de la LES. L'impact du spray sur la variation cycle à cycle des mouvements à grande échelle et par suite sur la formation du mélange a été mis en évidence dans un calcul à froid [63] sur un moteur essence à injection directe. Des développements sont toujours en cours sur la problématique de l'injection pour le moteur automobile, comme illustré par les récents travaux de Martinez *et al.* [95, 96] et Bharadwaj *et al.* [8]. Concernant la combustion proprement dite, le premier travail sur la combustion type moteur à allumage commandé en LES a été entrepris par Naitoh *et al.* [110]. Il a été suivi par les autres calculs prospectifs de Celik *et al.* [30], Richard *et al.* [134], Vermorel *et al.* [153] et Thobois *at al.* [148], les trois derniers travaux ayant notamment permis d'illustrer numériquement le phénomène de variation cycle à cycle de la combustion. Le moteur Diesel commence également à être investigué comme montré par l'article de Li *et al.* [90] et le travail de Hu *et al.* [72] qui propose une modélisation adaptée au fonctionnement Diesel conventionnel et HCCI.
De nombreux travaux restent néanmoins à réaliser pour démontrer l'intérêt de la LES sur configuration moteur comme le développement de lois de paroi efficaces pour le traitement des flux de chaleur ainsi que le développement de nouveaux outils pour aborder les modes de combustion complexes qui ont pu être évoqués au préalable.

Sujet de la thèse

Le présent travail de thèse s'inscrit dans la démarche de développement de la LES pour les applications moteur entreprise par l'IFP. L'objectif est de contribuer à la proposition d'un nouveau modèle générique pour traiter la combustion dans les moteurs à pistons. Celui-ci doit pouvoir décrire tous les modes de combustion que l'on peut observer dans un moteur : l'allumage par bougie, l'auto-inflammation, la propagation de flamme, la flamme de diffusion ou encore l'extinction. Néanmoins, le travail décrit ici s'est focalisé sur les modes de combustion principaux rencontrés en moteur à allumage commandé. Il reste possible d'intégrer des modèles pour les flammes de diffusion rencontrées dans les moteurs essence à injection directe ou Diesel aux modélisations proposées.
Dans la démarche, ceci est réalisé en s'appuyant sur des résultats obtenus lors de thèses récentes :

- les travaux de Richard [133] traitant de la prédiction de la vitesse de propagation de flamme dans un cadre LES. Un calcul d'application a par ailleurs été réalisé pour un moteur à allumage commandé ;

- les travaux de Galpin [57] utilisant la modélisation PCM-FPI développée pour la LES par Domingo *et al.* [42]. Ceci lui a permis de traiter la propagation de flamme et la combustion par auto-inflammation en milieu turbulent pour des configurations académiques. PCM-FPI présente l'avantage d'intégrer les effets de chimie complexe, ce qui est particulièrement intéressant pour la prédiction de la composition des produits de combustion et des délais caractéristiques des auto-inflammations.

Les développements détaillés par la suite ont été implantés dans le code de calcul AVBP dédié à la LES. Cet outil résout les équations de transport compressibles de Navier-Stokes sur des maillages structurés et non structurés. Il est exploitable sur des calculateurs massivement parallèles et possède un bon $speed - up$ sur ces systèmes, c'est-à-dire une diminution quasi-linéaire du temps de calcul avec l'augmentation du nombre de processeurs dédiés à cette tâche. Néanmoins, les fermetures proposées dans cette thèse pour la combustion restent transférables vers des applications RANS.

Organisation du manuscrit

Les travaux réalisés lors de cette thèse sont organisés de la façon suivante :

- un premier chapitre présente une revue des modèles susceptibles de répondre à la problématique de la thèse et à partir desquels seront développées de nouvelles approches. Des choix de modélisation y sont également proposés ;

- le chapitre 2 traite ensuite la fermeture du transport turbulent pour la modélisation de la combustion prémélangée dans un formalisme LES au travers de résultats de simulations. La modélisation du transport turbulent est un point important, bien que souvent négligé au profit de travaux soigneux sur la fermeture du taux de réaction, puisque la propagation d'un front de flamme en milieu turbulent est conditionné par un déséquilibre entre le taux de réaction local et le terme de transport. Les travaux décrits dans ce chapitre ont fait l'objet d'une communication lors du 6*th Mediterranean Symposium Combustion* tenu à Porticcio et ont été acceptés pour publication dans la revue *Combustion Science and Technology* ;

- le chapitre 3 décrit les modélisations élaborées à partir de quelques travaux du chapitre 1 pour traiter la propagation de flamme turbulente. Des résultats obtenus à partir de celles-ci pour la simulation d'une flamme stationnaire de laboratoire ont permis l'écriture d'un article soumis à la revue *Combustion and Flame*, également livré dans ce chapitre ;

- le chapitre 4 aborde la problématique de l'allumage et de la propagation de flamme instationnaire à partir des modélisations développées pour le régime prémélangé. Le contenu de ce chapitre correspond à un second article soumis à *Combustion and Flame* ;

- les principes de couplage entre les modèles spécifiques à la propagation de flamme et à l'auto-inflammation sont détaillés au chapitre 5 et sont accompagnés des résultats de cas tests simples permettant d'attester du bon comportement qualitatif des propositions ;

- des extensions des modèles détaillés au chapitre 5 sont proposées au chapitre 6. Les modèles obtenus n'ont pas été validés au travers de simulations mais tendent à répondre à la problématique majeure de la thèse qui est la proposition d'une modélisation la plus générique possible pour la combustion en moteur ;

– enfin le chapitre 7 met en avant des calculs moteur de type allumage commandé permettant de vérifier, à partir des modèles proposés au chapitre 5, la possiblité d'apparition du cliquetis et sa limitation en fonction de l'avance à l'allumage. D'autre part, deux cas test représentatifs du pré-allumage ont également été simulés. Ce chapitre et le précédent ont fait l'objet d'un article soumis au 33*rd International Symposium on Combustion*.

Chapitre 1

Modélisation de la combustion

Le but de la thèse est de contribuer à l'élaboration d'un modèle le plus générique possible, adapté à l'investigation par la simulation aux grandes échelles de tous les modes de combustion que l'on peut rencontrer dans les moteurs à allumage commandé. Citons comme premier cas, l'injection directe stratifiée pour les moteurs. La combustion devient alors relativement complexe puisque chronologiquement :

- l'allumage par bougie génère un noyau de flamme qui va croître jusqu'à l'établissement d'un front de flamme, ceci dans une zone éventuellement stratifiée en richesse ;

- le front de flamme commence à se propager vers les gaz frais à travers la stratification, ce qui correspond au dégagement de chaleur principal ; après passage du front, deux phénomènes secondaires se produisent :

  - du fait d'une traversée d'une zone trop riche ou trop pauvre, la flamme de propagation peut s'éteindre, auquel cas les gaz brûlés vont se mélanger aux gaz frais qui étaient en amont du front de flamme. Si les conditions thermodynamiques locales le permettent, une combustion caractérisée par le temps de mélange (*i.e.* en flamme de diffusion) va pouvoir se dérouler ;

  - après passage du front de flamme, le carburant imbrûlé subsistant va diffuser vers les zones pauvres et de même que précédemment, une combustion secondaire en flamme de diffusion (aussi appelée post-oxydation) peut s'établir.

D'autre part, pour les applications à des moteurs à allumage commandé à charge homogène, dans lesquels les phénomènes de cliquetis et de pré-allumage peuvent se manifester, il reste important de prédire précisément les délais d'auto-inflammations et les dégagements de chaleur associés. L'auto-inflammation étant pilotée par la réponse de la chimie aux conditions thermodynamiques locales, il est nécessaire d'intégrer dans la modélisation de ce phénomène des schémas cinétiques complexes apportant des réponses fidèles par rapport à la réalité sur une large gamme de points de fonctionnement (caractérisés par le quadruplet : richesse, pression, température et taux de dilution).
La présente thèse se focalisera essentiellement sur les problématiques d'allumage par bougie, de propagation de flamme et d'auto-inflammation en milieu turbulent, tout en gardant

à l'esprit des possibilités d'extension à des cas plus complexes évoqués préalablement.

Une première partie de ce chapitre est dédiée à une introduction à la combustion et à sa modélisation dans un cadre LES tandis que la seconde se focalise sur les outils de modélisation de la combustion proprement dite.

1.1 Introduction à quelques notions liées à la combustion

1.1.1 Equations de l'aérothermochimie

Des considérations physiques liées au phénomène de la combustion sont rappelées dans cette section.
L'aérothermochimie intègre le couplage entre la cinétique chimique et la mécanique des fluides décrite par les équations de Navier-Stokes. Les équations communément utilisées pour rendre compte de cette physique comprennent :

- la conservation de la masse :
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j}{\partial x_j} = 0 \tag{1.1}$$
où ρ est la densité, t le temps, u_j et x_j sont respectivement la composante j des vecteurs vitesse et position.

- le transport de la quantité de mouvement, l'équation de la composante i s'écrivant :
$$\frac{\partial \rho u_i}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i u_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} + F_i \tag{1.2}$$
où τ_{ij} correspond aux composantes du tenseur des forces visqueuses et F_i est la composante i d'une force à distance $\bar{F}$.

- le transport des espèces chimiques, au travers des équations de transport des fractions massiques des espèces. Celle de la fraction massique de l'espèce k (Y_k) s'écrit :
$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_j Y_k}{\partial x_j} = -\frac{\partial J_j^k}{\partial x_j} + \rho \dot{\omega}_k \tag{1.3}$$
où J_j^k est la composante j du flux moléculaire de l'espèce k et $\rho\dot{\omega}_k$ le taux de réaction par unité de volume de la même espèce.

- le transport d'une grandeur rendant compte de l'évolution énergétique du système, ici l'énergie totale non chimique e_t :
$$\frac{\partial \rho e_t}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho e_t + P\right) u_j}{\partial x_j} = \frac{\partial u_i \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial J_j^e}{\partial x_j} + F_e + \rho \dot{\omega}_e \tag{1.4}$$
où J_j^e est le flux d'énergie et $\rho\dot{\omega}_e$ est le dégagement de chaleur lié aux réactions chimiques.

Le tenseur des forces visqueuses apparaissant dans les équations de transport s'écrit :

$$\tau_{ij} = \mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \mu \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \tag{1.5}$$

Le flux J_j^k apparaissant dans l'équation de transport des espèces est fermé sous l'hypothèse d'une loi de Fick :

$$J_j^k = -\frac{\mu}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \tag{1.6}$$

où le nombre de Schmidt d'une espèce k compare la viscosité de l'écoulement à sa diffusivité :

$$Sc_k = \frac{\mu}{\rho D_k} \tag{1.7}$$

La loi de Fourier permet d'exprimer le flux d'énergie comme :

$$J_j^e = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_j} \tag{1.8}$$

Dans cette équation, λ est le coefficient de diffusion thermique exprimé comme $\lambda = \mu C_p / Pr$ où C_p est la capacité calorifique à pression constante du mélange et Pr est le nombre de Prandtl.

1.1.2 Modes de combustion élémentaires en régime laminaire

Les combustions en régime laminaire peuvent se produire en mode prémélangé, en non prémélangée ou dans un mode mixte (combustion partiellement prémélangée ou stratifiée). Les principaux types sont présentés succintement dans la suite, sachant qu'ils ont déjà été décrits extensivement par ailleurs [159, 128].

Flamme prémélangée

Cette combustion se produit lorsque les réactifs sont initialement parfaitement mélangés et qu'ils sont consommés par la propagation d'un front de flamme, l'interface séparant les gaz frais des gaz brûlés. Cette topologie est représentée par la figure 1.1.

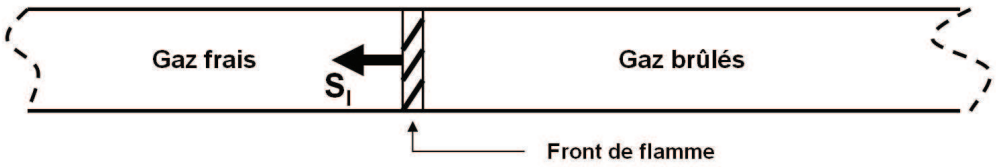


FIG. 1.1 – Principe de combustion prémélangée par propagation d'un front de flamme.

Pour un milieu contenant des gaz frais et dans lequel les conditions de température et de pression ne permettent pas l'auto-inflammation, la combustion en flamme de prémélange doit être initiée par un système d'allumage, comme cela est réalisé dans les moteurs automobiles à allumage commandé avec la bougie.

Le phénomène de propagation est assuré par un déséquilibre local entre consommation chimique et diffusion de la chaleur : des flux thermiques préchauffent la zone de gaz frais en amont du front de flamme et favorisent le déclenchement des réactions chimiques. Le front de flamme est caractérisé physiquement par son épaisseur δ_L et sa vitesse de propagation laminaire S_L. δ_L reste généralement de l'ordre du dixième de millimètre tandis que S_L évolue beaucoup en fonction du carburant considéré, de la richesse, de la pression et de la température des gaz frais. Les valeurs atteintes sont approximativement comprises entre 0.1 $m.s^{-1}$ et quelques $m.s^{-1}$ dans le cas de l'oxycombustion.
L'évolution de la flamme peut être décrite par une variable d'avancement classiquement notée c et définie de sorte que sa valeur soit 0 dans les gaz frais et 1 dans les gaz brûlés. En supposant les diffusivités moléculaires et thermiques égales et en négligeant les pertes thermiques, l'équation de transport de cette variable s'écrit :

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} c) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \rho \dot{\omega}_c \tag{1.9}$$

Combustion non prémélangée

Dans ce mode de combustion, les réactifs sont situés de part et d'autre d'une zone de réaction où le dégagement de chaleur se produit. La combustion est alors contrôlée par la diffusion moléculaire des réactifs vers cette zone, ce qui justifie l'appelation alternative de combustion en flamme de diffusion.
Par analogie avec les flammes prémélangées, ces flammes sont étudiées à l'aide d'une grandeur normalisée, la fraction de mélange Z (un scalaire passif), pour laquelle plusieurs définitions sont disponibles et qui a la propriété de valoir 0 pour l'oxydant et 1 pour le combustible. Son équation de transport s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} Z) = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \tag{1.10}$$

A partir de ces notions, la structure de la flamme de diffusion est schématisée par la figure 1.2.

Combustion en milieu partiellement prémélangé

Les combustions partiellement prémélangées correspondent à une combinaison des deux modes évoqués précédemment et sont plus ardues à traiter. Ainsi Domingo *et al.* [40] et Bray *et al.* [24] ont fait apparaître des termes supplémentaires au niveau de l'équation de transport de l'avancement c pour ces cas :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho c}{\partial t} \quad + \quad & \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} c) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \frac{1}{\partial Y_i / \partial c} \\ & \times \left(\rho \dot{\omega}_{Y_i} + \frac{\partial^2 Y_i}{\partial c^2} D \nabla c \cdot \nabla c + \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} D \nabla Z \cdot \nabla Z + \frac{\partial^2 Y_i}{\partial c \partial Z} D \nabla c \cdot \nabla Z \right) \end{aligned} \tag{1.11}$$

Ces combustions peuvent prendre la forme dite de "flamme triple" c'est-à-dire que trois zones réactives peuvent être distinguées comme schématisé par la figure 1.3. Le front qui se propage se décompose en deux fronts de flamme : l'un en zone riche, l'autre en zone pauvre. La troisième zone réactive est alors constituée par la flamme de diffusion qui s'établit en aval du front de flamme.

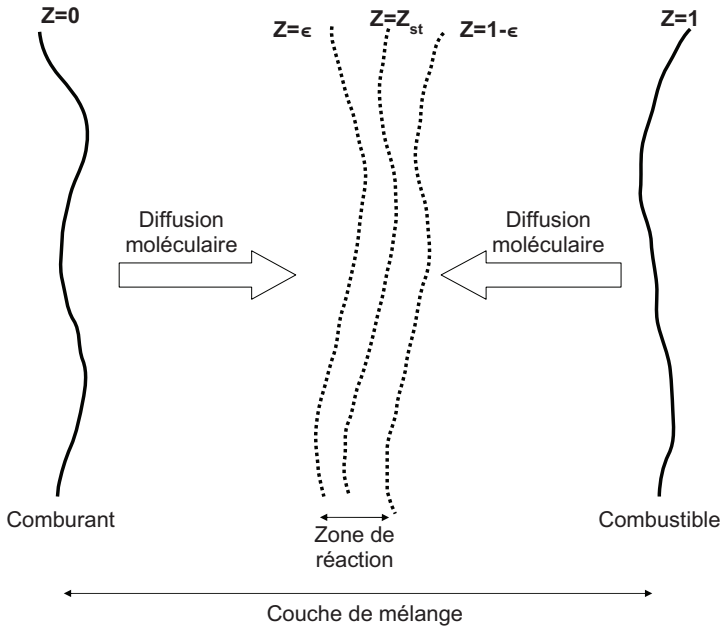


FIG. 1.2 – Schéma du principe de la combustion par flamme de diffusion établie. Z_{st} correspond à la fraction de mélange stœchiométrique.

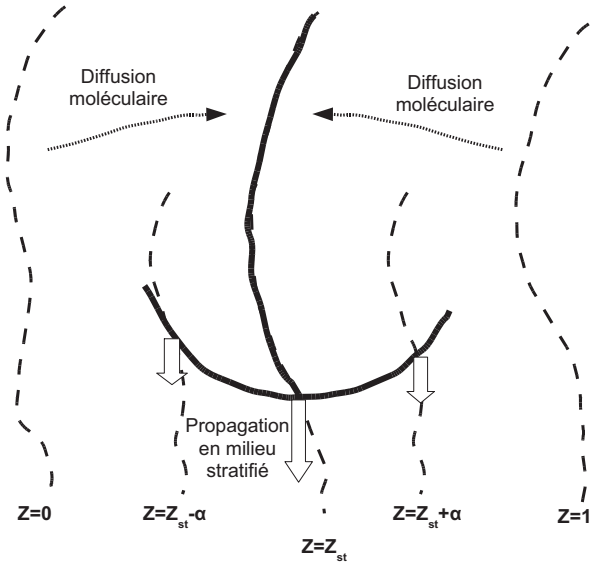


FIG. 1.3 – Représentation de la combustion en milieu partiellement prémélangé. Le trait épais matérialise la zone réactive : dans la partie basse, il s'agit d'un front de flamme prémélangé à richesse variable tandis que derrière celui-ci s'établit une combustion en flamme de diffusion.

1.2 Introduction à la LES

1.2.1 Formalisme

Le formalisme de la LES (pour *Large Eddy Simulation* en anglais) correspond physiquement à une coupure dans la zone inertielle du spectre de la turbulence à une échelle caractéristique Δ. Afin de traduire cette vision au niveau des équations de transport pilotant l'aérothermochimie du système, une opération de filtrage est réalisée, Δ définissant une taille caractéristique de filtre. D'un point de vue mathématique, la notion de filtrage est exprimée sous la forme d'un produit de convolution entre une grandeur physique φ et l'opérateur de filtrage noté G_Δ [139]. La grandeur filtrée $\overline{\varphi}$ est ainsi explicitée comme :

$$\overline{\varphi}(\underline{x},t) = \int \varphi(\underline{x}^*,t) G_\Delta(\underline{x}-\underline{x}^*) d\underline{x}^* \tag{1.12}$$

où $\underline{x}$ est le vecteur position.
Dans le solveur AVBP [108] employé dans cette thèse, le filtre utilisé n'est pas explicite et provient directement de la résolution des équations de transport sur un maillage. Notons enfin que par analogie avec les moyennes de Favre rencontrées dans les modélisations RANS, il est possible de déduire une notion de filtre de Favre $(\tilde{.})$ et de la relier à l'opération classique de filtrage $(\bar{.})$ suivant :

$$\bar{\rho}(\underline{x},t)\widetilde{\varphi}(\underline{x},t) = \overline{\rho\varphi}(\underline{x},t) \tag{1.13}$$

1.2.2 Mise en équation de la LES dans le solveur AVBP

Les équations de transport filtrées qui sont résolues par le programme AVBP lors des calculs LES sont rappelées dans cette partie.

Equation filtrée de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\rho}\left(\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i\tilde{u}_j\right)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} \tag{1.14}$$

Cette équation fait classiquement apparaître au premier membre : un terme d'accumulation, un terme de convection par l'écoulement résolu, un terme de transport non résolu créé par le filtrage et au second membre un terme lié aux forces de pression et l'effet du tenseur de déformation $\bar{\tau}_{ij}$. Ce dernier est défini sous la forme :

$$\bar{\tau}_{ij} \approx \mu\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\right) - \frac{2}{3}\mu\delta_{ij}\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \tag{1.15}$$

En utilisant l'approximation de Boussinesq, le transport non résolu de la quantité de mouvement et le tenseur de déformation $\tilde{S}_{ij}$ sont reliés suivant :

$$\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i\tilde{u}_j = -2\mu_T\tilde{S}^a_{ij} + \frac{1}{3}\delta_{ij}\left(\widetilde{u_k u_k} - \tilde{u}_k\tilde{u}_k\right) \tag{1.16}$$

où μ_T est la viscosité dynamique turbulente de sous-maille qui doit être modélisée. Elle est reliée à la viscosité cinématique turbulente ν_T à travers la relation : $\mu_T = \bar{\rho}\nu_T$.
Le tenseur $\tilde{S}^a_{ij}$ s'écrit :

$$\tilde{S}^a_{ij} = \tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\tilde{S}_{kk}\delta_{ij} \quad \text{avec} \quad \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}\right) \tag{1.17}$$

A partir de ces expressions, l'équation (1.14) se réécrit plus simplement comme :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{u}_j}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} + \frac{\partial(2\bar{\rho}(\nu + \nu_T)\tilde{S}^a_{ij})}{\partial x_j} \tag{1.18}$$

La pression $\bar{P}$ est déterminée par la loi des gaz parfaits.

Equations de transport filtrées des densités partielles
L'équation de transport de la densité partielle de l'espèce chimique indicée i s'écrit :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y_i}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho}\tilde{u}_j\widetilde{Y_i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{\rho}(\widetilde{Y_i u_j} - \widetilde{Y_i}\tilde{u}_j)}{\partial x_j} = \frac{\partial \overline{J^i_j}}{\partial x_j} + \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} \tag{1.19}$$

Un formalisme type Boussinesq, donc une hypothèse de transport par gradient, permet de fermer le transport non résolu qui provient de l'opération de filtrage :

$$\widetilde{Y_i u_j} - \widetilde{Y_i}\tilde{u}_j = -\bar{\rho}D_T\frac{\partial \widetilde{Y_i}}{\partial x_j} \tag{1.20}$$

où la diffusivité turbulente D_T est déduite la viscosité cinématique turbulente de sous-maille ν_T et du nombre de Schmidt turbulent Sc_T : $D_T = \nu_T/Sc_T$.
Le terme $\overline{J^i_j}$ représente un flux laminaire lié aux espèces chimiques et peut être réécrit comme : $\overline{J^i_j} = \bar{\rho}\widetilde{Y_i}V^i_j$ où V^i_j représente la vitesse de diffusion de l'espèce chimique indicée i dans la direction indicée j. L'approximation de Hirschfelder et Curtiss [70] s'écrit pour des fractions massiques :

$$\widetilde{Y_i}V^i_j = -D_i\frac{W_i}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_i}{\partial x_j} \tag{1.21}$$

où D_i est le coefficient de diffusion de l'espèce i dans le mélange, W_i est la masse molaire de cette espèce et $\overline{W}$ est la masse molaire moyenne du mélange. Afin d'assurer la conservation de la masse soit : $\sum_{i=1}^{especes}\widetilde{Y_i}V^i_j = 0$, une vitesse de correction V^c_k est ajoutée dans l'expression décrite dans l'équation (1.21), ce qui permet d'obtenir la fermeture suivante pour le flux laminaire :

$$\overline{J^i_j} = -\bar{\rho}\left(D_i\frac{W_i}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_i}{\partial x_j} - \widetilde{Y_i}V^c_j\right) \tag{1.22}$$

où $V^c_j = \sum_{i=1}^{especes} D_i\frac{W_i}{\overline{W}}\frac{\partial \widetilde{X}_i}{\partial x_j}$.

La résolution des équations pour les densités partielles $\bar{\rho}\widetilde{Y_i}$ permet, par somme, de déduire la densité locale $\bar{\rho}$.

Equation de transport filtrée pour l'énergie totale non chimique
La quantité $\tilde{e}_t$ représente l'énergie totale non chimique par unité de masse soit la somme entre les densités d'énergie cinétique résolue $e_c = 1/2 \sum_{k=1}^{dim} \tilde{u}_i^2$ et d'énergie sensible $e_s = \sum_{i=1}^{especes} \int_0^{T^*} c_{v,i}(T^*) dT^* \widetilde{Y}_i$.

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{e}_t}{\partial t} + \frac{\partial \left(\bar{\rho}\tilde{e}_t + \bar{P}\right) \tilde{u}_j}{\partial x_j} + \frac{\partial \left(\overline{(\rho e_t + P)\, u_j} - \left(\bar{\rho}\tilde{e}_t + \bar{P}\right) \tilde{u}_j\right)}{\partial x_j} = \frac{\partial \tilde{u}_i \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial \overline{J_j^e}}{\partial x_j} + \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_e \quad (1.23)$$

Le flux de chaleur $\overline{J_j^e}$ intègre la conduction de la chaleur ainsi qu'un flux lié à la diffusion des espèces :

$$\overline{J_j^e} = -\lambda \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} - \bar{\rho} \sum_{i=1}^{especes} \left(D_i \frac{W_i}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X}_i}{\partial x_j} - \widetilde{Y}_i V_j^c \right) h_{s,i} \quad (1.24)$$

Le transport non résolu est toujours clos suivant l'approximation de Boussinesq :

$$\overline{(\rho e_t + P)\, u_j} - \left(\bar{\rho}\tilde{e}_t + \bar{P}\right) \tilde{u}_j = -\bar{\rho} c_p \frac{\nu_t}{Pr_T} \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_j} \quad (1.25)$$

où Pr_T est le nombre de Prandtl turbulent.
Enfin le dernier terme de l'équation, qui représente le dégagemenet de chaleur dû à la réactivité des espèces chimiques, est exprimé comme :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_e = - \sum_{i=1}^{especes} \bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_i} \Delta h_{f,i}^0 \quad (1.26)$$

où $\Delta h_{f,i}^0$ est l'enthalpie massique de formation de l'espèce i.

Le calcul de la température est organisé de la façon suivante : une valeur initiale de température est supposée, puis à partir de celle-ci, des fractions massiques locales des espèces chimiques $\widetilde{Y}_i$ et des enthalpies sensibles tabulées pour chaque espèce (pour des températures comprises entre 0 et 5000 K), une enthalpie sensible $\widetilde{h_s^*}$ est exprimée et comparée à l'ordre de grandeur obtenu à partir de l'équation (1.23). Cette démarche est itérée jusqu'à obtenir l'accord entre les deux enthalpies pour déduire la température locale filtrée $\widetilde{T^*}$.

1.3 Modélisation de la combustion

Comme cela a été exprimé dans la partie précédente, les taux de réaction filtrés présents dans les équations de transport des densités partielles restent à fermer. D'autre part, dans le cas particulier de la propagation de flamme, il a été montré que la fermeture classique de type gradient du terme de transport turbulent n'était pas optimale. Ceci est d'autant plus problématique que la vitesse de propagation du front de flamme résulte du déséquilibre entre la divergence du flux turbulent et le taux de réaction filtré. Le chapitre 2 abordant le transport turbulent, au travers d'une revue bibliographique et de tests, seule la fermeture des taux de réaction filtrés est discutée ici.

A l'heure actuelle, il n'existe pas de modèle pour les moteurs à pistons combinant les modélisations de la flamme de prémélange et de la flamme de diffusion dans un cadre LES même si quelques propositions intégrant différents modes de combustion existent. Les modèles de combustion LES spécifiques à chaque mode de combustion rencontré en moteur sont tout d'abord détaillés dans ce qui suit afin de définir les éventuels points de départ pour une modélisation hybride. Des liens entre certains modèles ont déjà pu être mis en avant et sont également présentés. Ensuite, quelques modèles de la littérature dédiés aux moteurs à pistons sont présentés. Certains de ces modèles ont été proposés dans un contexte RANS et leur extension à la LES est discutée. Enfin, la formulation d'un modèle générique moteur pour la LES est abordée.

1.3.1 Modélisation de la combustion en LES

La modélisation de la combustion dans les moteurs alternatifs nécessite d'intégrer la combustion en flamme de prémélange, en auto-inflammation et en flamme de diffusion. Les propositions préalablement formulées dans un cadre LES sont ici rappelées, au travers des divers types d'analyses de la combustion qui peuvent être rencontrées à savoir la description de l'évolution d'une interface caractéristique, l'épaississement de la zone réactive et une modélisation statistique.

Approches décrivant l'évolution d'une interface

Equation de G

Le modèle à équation de G repose sur une description cinématique de la combustion prémélangée [79, 122] pour laquelle le front de flamme est localisé à l'aide de l'interface G=G_0. Dans un cadre LES, son équation de transport peut s'écrire :

$$\frac{\partial \bar{G}}{\partial t} + \bar{\mathbf{u}} \cdot \nabla \bar{G} = S_T \left| \nabla \bar{G} \right| \tag{1.27}$$

Bien que proposé initialement pour la combustion prémélangée, ce modèle, étendu par la prise en compte de bibliothèques de flammes laminaires à contre-courant et de pdf liées aux distributions en fraction de mélange et en G a permis de simuler une propagation de flamme dans un milieu stratifié [113]. Ainsi la fraction massique filtrée de l'espèce i s'écrit :

$$\widetilde{Y}_i(\underline{x}, t) = \iiint Y_{i,L}(Z, s, G) P(Z, s) P(G) dZ ds dG \tag{1.28}$$

où $Y_{i,L}$ provient des calculs de flammelettes à contre-courant intégrant les effets de chimie complexe. $P(Z, s)$ est une fonction densité de probabilité jointe rendant compte des fluctuations pour l'étirement (s) et la fraction de mélange (Z), $P(G)$ est une fonction du même type pour la distance au front de flamme. Le modèle est toujours en cours de développement comme l'indiquent les travaux récents de Pitsch [126] qui a pour sa part reformulé le filtrage de l'équation transport de G et de Moureau *et al.* [107] qui ont détaillé une démarche assurant une cohérence entre le taux de réaction de la variable d'avancement et la vitesse de déplacement apparaissant dans l'équation de transport de G. Néanmoins, deux inconvénients sont liés cette approche :

– l'absence de termes diffusifs dans l'équation (1.27) qui rend plus ardue l'implantation de ce formalisme d'un point de vue numérique ;

– la vitesse de propagation turbulente S_T est généralement fermée algébriquement (en s'inspirant de la formulation proposée par Peters [121] en modélisation RANS). Elle suppose de plus un équilibre local de la flamme avec l'écoulement turbulent, hypothèse qui s'avère fausse dans les moteurs à allumage commandé où le noyau de flamme à la bougie est très progressivement plissé par l'écoulement.

Modèles basés sur la densité de surface de flamme

Des modèles basés sur le concept de densité de surface de flamme sont également disponibles dans la littérature. Bien qu'initialement proposé pour le traitement de flammes non-prémélangées, ce modèle a surtout été développé pour la modélisation de propagations de flammes. Il repose sur l'évaluation de la densité de surface de flamme filtrée $\overline{\Sigma}$ (signifiant physiquement la limite du rapport entre la surface de flamme et le volume local, quand ce volume tend vers zéro), une interface continue supposée infiniment fine qui sépare la zone de gaz frais et la zone de gaz brûlés. L'exploitation de cette modélisation se réalise dans le cadre d'une hypothèse de flammelette, c'est-à-dire que l'évolution de la chimie au sein du front de flamme est indépendante des effets de la turbulence. Ce découplage entre la chimie locale et les effets de la turbulence sur le front de flamme permet d'écrire très simplement le taux de réaction filtré comme le produit entre la densité de surface de flamme et un taux de conversion laminaire :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t) = \rho^u S_L \overline{\Sigma}(\underline{x},t) \tag{1.29}$$

Classiquement, la chimie est modélisée très simplement en reliant l'évolution des espèces chimiques à la consommation du carburant à travers l'expression :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) = \rho^u S_L \overline{\Sigma}(\underline{x},t) \frac{W_i}{W_{fuel}} \alpha_i \widetilde{Y}_{Tfuel} \tag{1.30}$$

où α_i est le coefficient stœchiométrique de l'espèce i de la réaction globale de combustion. Il est alors notable que toute la modélisation de la cinétique chimique est contenue dans l'expression de S_L.

Dans le contexte LES, Boger [12] a adopté ce formalisme et a proposé la fermeture algébrique suivante :

$$\overline{\Sigma} = 4\sqrt{\frac{6}{\pi}}\Xi\frac{\bar{c}(1-\bar{c})}{\Delta} \tag{1.31}$$

La limitation de cette approche est que le plissement de sous-maille Ξ reste à modéliser. Celui-ci peut-être supposé spatialement constant ou fermé par des expressions similaires à celles proposées par Colin *et al.* [36] pour TFLES. Ce modèle souffre donc également de l'hypothèse d'équilibre du plissement de la flamme.

La densité de surface de flamme peut également être déterminée à partir d'une équation de transport, comme proposé par Hawkes et Cant [66] et Richard [133], afin de s'affranchir de l'hypothèse d'équilibre local. Ce dernier a ainsi développé le modèle ECFM-LES (*Extended Coherent Flame Model for LES*) soit le modèle de flamme cohérente RANS réécrit pour la simulation LES. ECFM-LES étant initialement voué à la simulation de la combustion par allumage commandé, il contient un sous-modèle pour la phase d'allumage

et il a déjà été exploité avec succès pour la simulation LES d'une dizaine de cycles moteurs consécutifs [153].
Bien que ECFM-LES puisse propager une flamme en milieu stratifié (S_L étant notamment fonction de la richesse locale), les mécanismes d'extinction et de chimie de post-flamme ne sont pas actuellement pris en compte. D'autre part, pour des applications cibles autres que le moteur, il est notable que l'évolution de certaines espèces n'est pas prédite.

Equation de transport du plissement
Toujours dans le cadre de la modélisation de flammes prémélangées, Weller *et al.* [163] ont proposé une équation de transport pour le plissement de sous-maille Ξ comme alternative au transport de la densité de surface de flamme.

$$\Xi = \frac{\overline{\Sigma}}{|\nabla \bar{c}|} \tag{1.32}$$

L'utilisation de ce modèle peut poser quelques problèmes comme par exemple la valeur à donner au plissement en dehors du front de flamme, la difficulté de fermeture des termes de l'équation de transport et des aspects numériques liés aux zones très turbulentes. Le plissement tendra ainsi vers des valeurs très élevées si le gradient de variable d'avancement est très faible tandis que la densité de surface de flamme est très importante.

Modèles à épaississement de flamme

O'Rourke *et al.* [115] et Butler *et al.* [27] ont initié le principe de l'épaississement pour surmonter les problèmes de résolution du front de flamme. Celui-ci consiste à multiplier la diffusivité par un facteur d'épaississement F, les taux de réactions chimiques étant simultanément divisés par F de façon à préserver une vitesse de propagation de flamme correcte en considérant l'expression théorique suivante pour S_L :

$$S_L = \sqrt{D_{th}\dot{\omega}} \tag{1.33}$$

où D_{th} est la diffusivité thermique et $\dot{\omega}$ le taux de réaction moyen. Avec le passage d'une épaisseur de flamme laminaire δ_L à $F\delta_L$, l'interaction entre la turbulence et la chimie est modifiée. En effet, ces interactions peuvent être quantifiées globalement par le nombre de Damköhler qui compare un temps caractéristique de la turbulence à un temps chimique :

$$Da = \frac{l_T}{u'}\frac{S_L}{\delta_L} \tag{1.34}$$

L'épaississement multiplie le nombre de Damköhler par un facteur $1/F$, ce qui rend artificiellement la flamme de moins en moins sensible aux mouvement turbulents. Aussi Colin *et al.* [36] ont-ils proposé une correction au modèle en intégrant une fonction d'efficacité E, qui peut être perçue comme un plissement de sous-maille, soit :

$$S_T = ES_L \tag{1.35}$$

La fonction d'efficacité E a été établie à partir de la réalisation de DNS d'interactions entre une paire de tourbillons contra-rotatifs et un front de flamme et est exprimée en fonction des ratios u'_Δ/S_L et $\Delta/F\delta_L$ où Δ est la taille de filtre et u'_Δ la fluctuation de

vitesse pour cette échelle. Les taux de réaction filtrés des espèces chimiques s'écrivent alors :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = \bar{\rho}\frac{E}{F}\dot{\omega}_{Y_i} \tag{1.36}$$

où $\dot{\omega}_{Y_i}$ est exprimé à partir d'une loi d'Arrhénius.
Finalement ce modèle connu comme TFLES (pour *Thickened Flame for LES*) a comme avantage un formalisme simple et une robustesse numérique assurée par l'épaississement. D'autre part, il permet potentiellement le traitement de flammes non prémélangées [89]. L'utilisation de lois d'Arrhénius pour la fermeture des taux de réaction des espèces chimiques permet d'intégrer directement des phénomènes physiques comme les interactions flamme/paroi néanmoins elle impose le transport de toutes les espèces chimiques du schéma cinétique adopté. Pratiquement, des chimies réduites sont donc exploitées lors des applications de TFLES. De par la formulation algébrique de la fonction E, ce modèle suppose également un équilibre pour le plissement de la flamme comme les modèles de Boger ou à équation de G. Il faut aussi noter qu'il est connu que les termes sources filtrés ou moyens n'ont pas une forme de type Arrhénius, comme le montre par exemple la théorie BML [26].

Modélisations statistiques

Une approche complétement différente de celles évoquées préalablement consiste à modéliser l'impact de la turbulence sur une quantité φ par une fonction densité de probabilité (ou pdf pour *probability density function* en anglais). Les propriétés suivantes sont vérifiées par la pdf :

$$\begin{aligned} \int \tilde{P}(\varphi^*)d\varphi^* &= 1 \\ \int \varphi^* \tilde{P}(\varphi^*)d\varphi^* &= \widetilde{\varphi} \\ \int \left(\varphi^{*2} - \widetilde{\varphi^*}^2\right) \tilde{P}(\varphi^*)d\varphi^* &= \widetilde{\varphi^2} - \widetilde{\varphi}^2 \end{aligned} \tag{1.37}$$

Deux philosophies ont été adoptées pour la détermination de la pdf, celle-ci pouvant en effet être transportée ou présumée. Le premier concept a été proposé par Pope [129] et permet une fermeture directe des taux de réaction chimiques moyennés mais il soulève quelques inconvénients : des termes restent en effet à fermer dans l'équation de transport de la pdf et celle-ci doit être résolue par une méthode Monte-Carlo qui est peu précise. Quant à la pdf présumée, elle est utilisée dans plusieurs modélisations.

CMC

Le modèle CMC (*Conditional Moment Closure*) a été initialement proposé par Bilger [9] et Klimenko [80] et propose de discrétiser le front de flamme en iso-surfaces $c = c^*$ dans le cas d'une flamme de prémélange et la couche de mélange par des iso-surfaces $z = z^*$ dans le cas d'une flamme de diffusion. Dans cette configuration, les densités partielles liées aux espèces chimiques sont déduites de l'équation :

$$\bar{\rho}\widetilde{Y}_i(\underline{x}, t) = \int_0^1 \left(\overline{\rho Y_i | Z = Z^*}\right) \overline{P}(Z^*, \underline{x}, t)dZ^* \tag{1.38}$$

où les fractions massiques conditionnées $\left(\overline{\rho Y_i | Z = Z^*}\right)$ sont transportées et la pdf en fraction de mélange est présumée.
Le modèle CMC a récemment été utilisé par Navarro-Martinez *et al.* [111] pour le calcul LES d'une flamme décrochée stabilisée par auto-inflammation et semble donc se prêter à des applications Diesel.
Bien que peu d'hypothèses soient émises pour l'élaboration de ce modèle, son inconvénient majeur est un coût CPU très élevé puisque le nombre d'équations à résoudre correspond au produit "nombre d'espèces chimiques considérées" × "nombre d'iso-surfaces discrétisant la zone de réaction".

Equation des flammelettes
La notion de pdf présumée peut être couplée à l'équation instationnaire des flammelettes spécifiques aux flammes de diffusion qui a été proposée par Peters [120] :

$$\rho \frac{\partial Y_k}{\partial t} = \rho \chi_Z \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \rho \dot{\omega}_{Y_k} \tag{1.39}$$

où χ_Z est le taux de dissipation scalaire, explicité sous la forme : $\chi_Z = D \nabla Z \nabla Z$. Pour des flammes de diffusion laminaires à contre-courant et sous l'hypothèse d'une densité constante, la dissipation scalaire peut-être directement évaluée à partir de l'étirement a [122] :

$$\chi_Z = \frac{a}{2\pi} exp\left(-2\left[erf^{-1}(1-2Z)\right]^2\right) \tag{1.40}$$

Les solutions de cette équation permettent de fermer la composition filtrée dans le code de CFD sous la forme :

$$\widetilde{Y_k}(\underline{x}, t) = \int Y_k(Z^*; t) \tilde{P}(Z^*, \underline{x}, t) dZ^* \tag{1.41}$$

Des travaux récents [101, 100] dans un cadre RANS se sont inspirés de cette démarche en résolvant l'équation de flammelette (Eq. (1.39)) pour une variable d'avancement Y_c à partir d'un terme source $\dot{\omega}_{Y_c}$ fourni par des calculs de réacteurs homogènes basés sur des schémas cinétiques complexes. Le taux de réaction moyen était fourni par l'équation de flammelette et d'une pdf présumée en fraction de mélange :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c} = \int \frac{\partial Y_c}{\partial t}(Z^*; t) \widetilde{P}(Z^*) dZ^* \tag{1.42}$$

Cette modélisation a abouti à des résultats intéressants pour la simulation d'une flamme partiellement prémélangée [100] et des premiers travaux d'extension à la LES ont été entamés [99].

PCM-FPI
PCM-FPI (*Presumed Conditional Moments*-FPI) avait été développé pour des simulations RANS de flammes partiellement prémélangées [156].
La chimie de la flamme turbulente est décrite à partir des valeurs moyennes $\widetilde{\varphi}$ (où $\widetilde{\varphi}$ représente une fraction massique ou un taux de réaction) comme :

$$\widetilde{\varphi}(\underline{x}, t) = \int \int \varphi(c^*, Z^*) \overline{P}(c^* | Z^*) \widetilde{P}(Z^*) dc^* dZ^* \tag{1.43}$$

Les quantités $\varphi(c^*, Z^*)$ proviennent d'une table constituée à partir de calculs préalables de combustions en régime laminaire par propagation de flamme ou en auto-inflammation. L'hypothèse de base associée au modèle est que l'avancement de la chimie est identique pour toutes les fractions de mélange soit $\overline{P}(c^*|Z^*) \approx \overline{P}(c^*)$. Cette supposition, qui ramène PCM-FPI à une version simplifiée de CMC, est néanmoins très forte et a pu être mise en défaut récemment pour une flamme turbulente partiellement prémélangée [100].
Dans ses travaux [18, 19], Bradley a exploité des β-pdf pour modéliser des distributions de température, ces fonctions ayant l'avantage de changer de forme en fonction de deux paramètres : la valeur moyenne du scalaire considéré et sa variance. Les β-pdf ont été reprises dans la modélisation PCM-FPI pour fermer $\overline{P}(c^*)$ et $\widetilde{P}(Z^*)$.

PCM-FPI a été exploité dans le cadre de simulations RANS pour des flammes de diffusion [156] et de prémélange [54]. Dans un cadre LES, le modèle a été utilisé pour la simulation d'allumage [144] et d'auto-inflammation en milieu turbulent hétérogène [58], de flammes partiellement prémélangées [42] et de flammes parfaitement prémélangées. Notons que pour ces dernières, les simulations ont été réalisées en utilisant des pdf présumées en avancement différentes. Galpin *et al.* [59] ont simulé une flamme turbulente stabilisée par *swirl* et la fermeture classique donnée par la β-pdf a donné de bons résultats. Une précédente modélisation avait été réalisée en présumant une σ-pdf pour la pdf en avancement [41]. Ces travaux ont été relayés par ceux de Bray *et al.* [23] qui ont proposé une pdf explicitée par des échelles de longueurs de la flamme laminaire, de façon analogue à Domingo *et al.* [41], pour montrer que le choix de la β-pdf n'était pas optimal dans le régime des flammelettes à partir de comparaisons avec des DNS.

Bien que ce modèle ait été appliqué à de nombreux modes de combustion, quelques inconvénients sont cependant à mettre en avant :

- des problèmes théoriques sont rencontrés pour la modélisation de la flamme de prémélange et sont expliqués au chapitre 3 ;

- l'hypothèse d'indépendance de l'avancement par rapport au niveau local de richesse reste à discuter pour la modélisation de flammes partiellement prémélangées au vu de résultats récents ;

- il n'existe pas de formulation unique du modèle puisque celui-ci subit des adaptations en fonction de son application (choix de la pdf en avancement, bases de données FPI établies à partir de flammes laminaires prémélangées non étirées ou de réacteurs homogènes).

Couplages de modèles "mono-mode" pour la modélisation de combustions mixtes

Dans le contexte de la LES, quelques modèles intégrant simultanément deux régimes de combustion ont déjà été proposés. Takeno *et al.* [164] avaient proposé un indice de flamme, basé sur le produit scalaire des vecteurs normaux du carburant et de l'oxydant, pour déterminer si la combustion locale se déroulait en flamme de diffusion ou en prémélange.

En effet, une dissipation scalaire dite croisée $\chi_{F,o}$ peut s'écrire sous la forme :

$$\chi_{F,o} = -D\nabla Y_F \cdot \nabla Y_o \tag{1.44}$$

Dans le cas d'une flamme prémélangée, l'oxydant et le carburant sont situés du même côté de la zone réactive (ici le front de flamme) tandis que dans le cas d'une flamme de diffusion, oxydant et carburant sont localisés de part et d'autre de celle-ci (ici la couche de mélange), d'où un changement de signe de $\chi_{F,o}$ pour chaque mode.
Domingo *et al.* [40] ont étendu à la LES ce formalisme pour l'appliquer à un calcul de flamme décrochée turbulente. La composition locale est alors donnée par une combinaison linéaire des chimies prédites par la propagation du front de flamme et la flamme de diffusion. Les travaux récents de Knudsen et Pitsch [82] traitent de la même problématique mais proposent une alternative à l'expression de l'indicateur. Une équation générique pour une variable d'avancement a été formulée en reprenant les équations de transport des scalaires et en y ajoutant l'effet d'un paramètre additionnel indexant les flammelettes. Les termes associés à la combustion prémélangée et non-prémélangée sont alors identifiés dans l'équation obtenue et la comparaison de leur ordre de grandeur par rapport au taux de réaction de l'avancement fournit un nouveau critère indiquant le mode de combustion local. Le critère a été utilisé avec succès pour la modélisation d'une flamme turbulente stabilisée par *swirl*.

Lors de leur simulation de la flamme décrochée de l'expérience de Cabra *et al.* [29], Domingo *et al.* [42] ont proposé un concept permettant de lier des taux de réaction filtrés pour l'auto-inflammation et la propagation de flamme en milieu hétérogène. Ceci est permis suivant la formulation :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = (1-\bar{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{AI} + \bar{c}\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{PF} \tag{1.45}$$

où les taux de réaction filtrés $\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{AI}$ et $\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{PF}$ sont fermés à partir de la modélisation PCM couplée à des tabulations FPI respectivement réalisées à partir de calculs de réacteurs homogènes en auto-inflammation et de flammes laminaires stationnaires monodimensionnelles. Cependant, la gestion des transitions entre les modes de combustion au travers d'une pondération par la variable d'avancement filtrée peut être discutée. En effet, rien ne garantit que les facteurs $(1-\bar{c})/\bar{c}$ permettent de retrouver la bonne vitesse de propagation de la flamme turbulente ou le bon délai d'auto-inflammation quand ces combustions se produisent seules.

Enfin le travail récent de Hu *et al.* [72] présente l'utilisation d'un indice $\tilde{\gamma}$ pour une application au moteur Diesel déterminant si la combustion prend la forme d'une combustion en masse ou d'une flamme de diffusion. A cette fin, le taux de dissipation scalaire de la fraction de mélange $\widetilde{\chi}_Z$ est comparé à un taux de dissipation scalaire critique en dessous duquel la structure de flammelette n'existe plus. Ainsi $\tilde{\gamma} = 1$ si $\widetilde{\chi}_Z > \chi_c$ et $\tilde{\gamma} = \widetilde{\chi}_Z/\chi_c$ si $\widetilde{\chi}_Z \leq \chi_c$. Les taux de réaction des espèces chimiques s'écrivent alors :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = \tilde{\gamma}\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{FD} + (1-\tilde{\gamma})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{HCCI} \tag{1.46}$$

Le détail des fermetures adoptées pour chaque mode de combustion (flamme de diffusion (FD) et combustion homogène (HCCI)) est décrit plus loin dans la suite.

Synthèse des modèles LES

Les aptitudes théoriques des divers modèles sont finalement résumées dans le tableau 1.1. Les modèles les plus complets s'avèrent être PCM-FPI et CMC, ceux-ci intégrant les effets de chimie complexe et étant adaptés *a priori* à tous les modes de combustion. Néanmoins CMC propose un formalisme onéreux à exploiter du point de vue des ressources informatiques. De ce fait, PCM-FPI reste donc le meilleur candidat pour une modélisation générique de la combustion dans les moteurs à pistons. Cependant, certaines difficultés restent à lever comme la définition d'une pdf adaptée aux flammes de prémélange, le traitement de l'auto-inflammation en milieu fortement stratifié, la simulation de l'allumage par bougie ou encore la gestion des transitions entre les modes de combustion.

Modèle	AI	FD	FP	Allumage	Chimie
Equation de G	-	-	+	+	librairie de flammelettes à contre-courant
Equation de $\overline{\Sigma}$	-	-	+	+	chimie à une étape pour l'oxydation du carburant
Equation de Ξ	-	-	+	+	chimie à une étape pour l'oxydation du carburant
TFLES	-	+	+	+	chimie réduite
CMC	+	+	+	+	chimie complexe
Eq. de flammelettes	+	+	-	-	chimie complexe
PCM-FPI	+	+	+	+	chimie complexe tabulée (FPI)

Tab. 1.1 – Synthèse des modes de combustion traités par chaque modèle et de l'intégration des effets de la chimie. Seules les formes les plus détaillées de cette intégration sont indiquées.

Parmi les modèles présentés, certains intègrent les effets de chimie complexe par des méthodes de tabulation, ce qui est particulièrement intéressant pour la prédiction fine des délais d'auto-inflammations et des structures des zones réactives. Les méthodologies usuellement employées sont présentées dans la partie suivante.

1.3.2 Tabulation de la chimie

ILDM

L'approche ILDM (pour *Intrisic Low-Dimensional Manifold* en anglais) a été proposée par Maas et Pope [92, 93] et est basée sur des comparaisons d'échelles de temps chimiques. Cette théorie repose sur le fait que plusieurs compositions initiales peuvent produire le même état d'équilibre, mais qu'à partir d'un temps caractéristique t_M, l'état du système chimique peut être décrit par un nombre réduit de variables (voir figure 1.4).

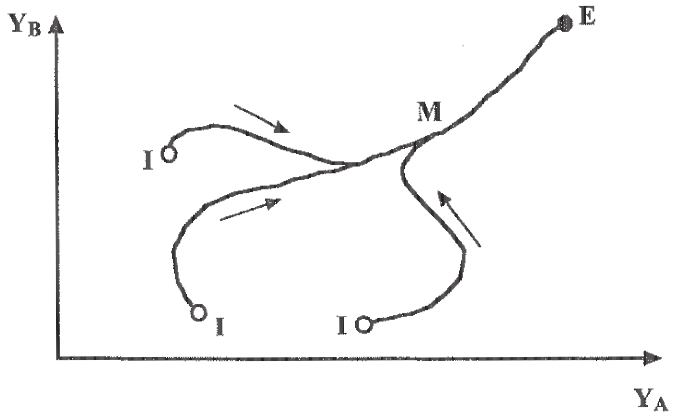


FIG. 1.4 – Evolution de l'espèce chimique Y_B en fonction de l'espèce Y_A pour des compositions initiales I différentes.

Le tronçon ME de la courbe, correspondant à l'intervalle de temps compris entre t_M et le temps où l'équilibre est atteint, représente le sous-espace appelé *manifold* en anglais. Un formalisme mathématique permet de déterminer automatiquement le *manifold* à partir d'échelles de temps caractéristiques du schema cinétique. Il est alors possible de connaître les taux de réaction et les fractions massiques en fonction d'un ensemble réduit de variables, généralement une variable d'avancement et une variable représentant le mélange. ILDM donne de bonnes prédictions pour les espèces majoritaires mais son emploi est limité. En effet, le caractère particulier de la cinétique chimique dans les zones de basses températures impose alors de choisir un nombre important de variables pour assurer sa description. Une extension a été récemment proposée pour palier ce problème par Bykov et Maas [28] (REDIM : *Reaction Diffusion Manifold*). Dans cette approche, la diffusion peut être extraite de flammelettes 1D.

FPI

Afin de surmonter l'inconvénient des zones mal décrites par ILDM, Gicquel *et al.* [62] proposent d'utiliser une méthode dite de "flammelettes" pour générer des tables à partir de calculs de flammes laminaires monodimensionnelles prémélangées en utilisant des schémas cinétiques complexes. La chimie complexe est alors explicitée en fonction d'un nombre limité de scalaires (variable d'avancement, richesse et enthalpie). Cette approche a permis de retrouver les résultats de ILDM pour les régions de hautes températures et peut être perçue comme la prolongation de l'approche ILDM (d'où son nom FPI : *Flame Prolongation of ILDM*).

Ce formalisme a été étendu aux réacteurs parfaitement agités par d'autres auteurs [42, 101, 58]. FPI est équivalent à FGM (*Flamelet-Generated Manifold*) développé par Van Oijen *et al.* [152].
Pour une application spécifique au moteur à combustion interne, quelques inconvénients ont été récemment mis en avant. Après la combustion principale qui s'est déroulée au point mort haut, la chimie des gaz brûlés évolue toujours pendant la phase de détente. Les tabulations FPI sont réalisées préalablement à partir de calculs de réacteurs homogènes pour lesquels on impose une pression ou un volume constant, ce qui ne correspond pas à la réalité physique de la détente et qui aboutit à de mauvaises prédictions des polluants. Des développements sont actuellement en cours pour lever cette limite [75, 74, 102].

1.3.3 Modèles génériques existants pour la simulation moteur

La prise en compte par la modélisation des modes de combustion complexes rencontrés en moteur a été envisagée par de précédents travaux en RANS comme en LES. Ceux-ci sont présentés ci-dessous.

Moteur à allumage commandé

Citons en premier lieu les propositions d'Haworth [67] spécifiques à la combustion dans un moteur à allumage commandé. Celles-ci proviennent de travaux préalables sur le transport de pdf pour application à des calculs moteur. Trois étapes de combustion sont alors posées pour une flamme prémélangée établie suite à un allumage par bougie, comme indiqué sur la figure 1.5 :

- Etape I : la possibilité d'une auto-inflammation en amont du front de flamme ;
- Etape II : le dégagement de chaleur principal dans la zone de front de flamme ;
- Etape III : une combustion "post-flamme" : après passage du front dans la zone stratifiée en richesse, l'oxygène des zones pauvres et le carburant des zones riches vont diffuser l'un vers l'autre pour former une flamme de diffusion.

Les Etapes I et III sont modélisées par des pdf transportées, tandis que la flamme principale est prise en compte par une vision eulérienne. A cette fin, une équation de transport d'une variable d'avancement moyennée est proposée pour laquelle le taux de production est clos suivant un modèle de flammelette algébrique. Les perspectives consistent d'une part en l'intégration d'une équation de transport pour la densité de surface de flamme et d'autre part en une tabulation de flammelettes laminaires pour stocker la vitesse de flamme laminaire en fonction des conditions locales dans la chambre.
Cette modélisation, extensible d'après l'auteur à la LES, impose néanmoins de disposer de puissantes machines de calcul, la méthode des pdf transportées imposant de résoudre pour chaque particule une équation pour déterminer sa position, sa vitesse et le vecteur composition associé. D'autre part, le système d'équations eulérien doit également être résolu (quantité de mouvement, enthalpie, modèle $k - \epsilon$).

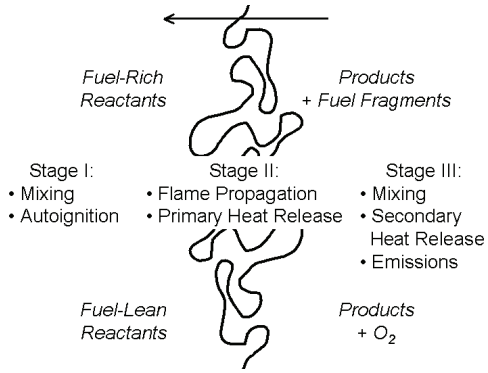


FIG. 1.5 – Représentation des 3 étapes de la modélisation de Haworth [67]. Etape I : Auto-inflammation, mélange. Etape II : Flamme principale. Etape III : Combustion secondaire par diffusion entre le carburant imbrûlé et l'oxydant.

D'autres travaux, gardant un formalisme relativement proche furent proposés par la suite. Ainsi Tan et Reitz [146] ont-ils présenté un modèle générique en supposant que la combustion dans les moteurs où la charge était stratifiée prenait la forme d'une flamme triple. Le modèle à équation de G est utilisé pour localiser avec l'iso-surface G=0 le front de flamme qui se propage vers la zone de gaz frais. Le taux de conversion des espèces par la flamme de prémélange est alors exprimé sous la forme :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = \bar{\rho}\left(\widetilde{Y}_i^{eq} - \widetilde{Y}_i^{u}\right)\overline{\Sigma}S_L \tag{1.47}$$

où $\tilde{Y}_i^u$ et $\tilde{Y}_i^{eq}$ sont respectivement les fractions massiques de l'espèce chimique i avant la réaction chimique et à l'état d'équilibre thermodynamique. La vitesse de propagation S_T tend vers 0 lorsque les limites d'inflammabilités en termes de richesse sont atteintes. Dans cette situation, l'iso-surface G=0 existe toujours et délimite désormais la zone dans laquelle la combustion par flamme de diffusion va se produire. Les taux de réaction des espèces vont s'écrire sous la forme de relaxations de leur composition locale vers l'état d'équilibre thermodynamique suivant un temps caractéristique de la turbulence τ_T :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = \bar{\rho}\frac{\widetilde{Y}_i^{eq} - \widetilde{Y}_i}{\tau_T} \tag{1.48}$$

Cette modélisation est finalement couplée à un modèle d'allumage lagrangien (application au moteur à allumage commandé) et à un modèle d'auto-inflammation basé sur une schéma cinétique réduit (cas d'allumage par compression du mélange).
Ce modèle global a l'avantage d'être simple et par conséquent robuste et peut facilement être utilisé en LES. Les limitations suivantes peuvent être mises en avant : il est peu probable que la chimie réduite soit valide pour tous les points de fonctionnement rencontrés en moteur et la modélisation de la combustion de post-flamme semble trop simplifiée.

Moteur Diesel

Plusieurs modélisations ont été proposées, chacune dans l'optique de rendre compte de l'auto-inflammation et des combustions en flamme de diffusion et HCCI.

Steiner *et al.* [142] ont tout d'abord proposé une telle modélisation générique de cas Diesel. Celle-ci intègre deux modèles d'auto-inflammation :

- pour le cas Diesel, le dégagement de chaleur pendant l'auto-inflammation est négligé et l'espèce CO fait office de variable d'avancement. Son évolution est pilotée par la tabulation de réacteurs homogènes à pression constante. La transition vers le modèle de combustion principal est assurée pour un seuil atteint par l'avancement ;

- pour le cas HCCI, le temps de réaction est évalué à partir d'une équation de transport et le dégagement de chaleur local est interpolé dans une table en fonction de ce temps et des paramètres thermodynamiques locaux. Lorsque le dégagement de chaleur dépasse un seuil critique, le modèle de combustion principal est activé.

Les taux de réaction des espèces liés à la combustion tant en prémélange qu'en flamme de diffusion s'écrivent sous la forme d'une relaxation de la composition locale vers la composition solution de l'équation de flammelette stationnaire. Ne manquerait qu'une modélisation de l'allumage par bougie pour obtenir un modèle propre à l'injection directe essence néanmoins le pilotage de la vitesse du front de flamme n'est pas explicite et l'impact du choix des seuils de transition n'est peut-être pas sans conséquence sur les résultats. La modélisation de la flamme de diffusion souffre du même problème que celui rencontré avec le modèle précédent.

Plus récemment, Hu *et al.* [72] ont présenté un modèle traitant simultanénement la combustion de type Diesel et la combustion HCCI dans un cadre LES [72]. Deux phases de la combustion sont tout d'abord identifiées : une phase de chimie lente par rapport à la turbulence générée par l'injection du carburant lors de l'auto-inflammation suivie par phase de chimie à haute température. La première partie est traitée par la résolution directe de la chimie en intégrant une cinétique chimique réduite. Pendant la seconde partie, les taux de réaction des espèces chimiques s'écrivent sous la forme :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = \tilde{\gamma}\bar{\rho}\frac{\widetilde{Y}_i^{fl} - \widetilde{Y}_i}{\tau} + (1-\tilde{\gamma})\bar{\rho}\frac{\widetilde{Y}_i^{eq} - \widetilde{Y}_i}{\tau} \tag{1.49}$$

Dans l'équation (1.49), $\tilde{\gamma}$ est l'indice présenté précédemment (1.3.1). $\widetilde{Y}_i^{fl}$ provient de la résolution de l'équation de flammelette stationnaire, tandis que $\widetilde{Y}_i^{eq}$ correspond à la valeur atteinte par la fraction massique de l'espèce i à l'état d'équilibre pour une combustion homogène. τ est une échelle de temps caractéristique déterminée par des calculs Diesel préalables.
Le choix de la cinétique réduite pour le début de l'auto-inflammation peut être critiquable puisqu'il n'est pas sûr que celle-ci rende compte précisément du délai d'auto-inflammation pour toutes les conditions thermodynamiques et chimiques rencontrées lors d'un calcul moteur. D'autre part, la cinétique de la combustion est contenue dans le temps caractéristique τ qui est exprimé sous la forme d'une loi d'Arrhénius dont les constantes ont été calées et le caractère universel de ce modèle pour le calcul moteur est discutable.

Moteur à allumage commandé et injection directe / Diesel

Le modèle ECFM-3Z, contemporain aux deux précédents modèles est détaillé dans l'article de Colin et Benkenida [34].
Le modèle ECFM seul correspond à la modélisation de la combustion rencontrée dans un moteur à allumage commandé. ECFM est basé sur la décomposition de la cellule en une zone "gaz frais" et une zone "gaz brûlés", les deux étant physiquement séparées par le front de flamme. La consommation du carburant par la flamme de prémélange est modélisée suivant un modèle de flammelette pour lequel l'équation de transport de la densité de surface de flamme $\overline{\Sigma}$ est résolue. D'autre part, l'éventualité de la production du cliquetis est intégrée *via* le modèle TKI [37]. Une équation de transport permet d'accéder localement à un précurseur d'auto-inflammation qui rend compte de la progression en temps vers le délai de flamme froide. Celui-ci atteint, le dégagement de chaleur lié à l'auto-inflammation est interpolé dans une table créée à partir de calculs de réacteurs homogènes à pression constante basés sur une cinétique chimique complexe.

Ce modèle a été étendu aux cas de combustion dans des zones stratifiées en richesse comme illustré par la figure 1.6 par intégration d'une décompostion en trois niveaux de mélange : une zone d'air pur, une zone de carburant pur et une zone où les deux réactifs sont mélangés. Juste après l'injection du spray dans la chambre, il n'existe dans la cellule qu'une zone d'air pur F^u et une zone de carburant pur A^u. Un taux de mélange évoluant suivant un temps caractéristique de la turbulence va piloter les transferts du carburant pur et de l'air pur vers la zone de mélange M^u. Dans le cas d'un moteur essence à injection directe, la combustion est initiée par un allumage par bougie, permettant le développement d'un noyau de flamme vers une flamme établie turbulente se propageant vers les gaz frais. Le carburant non consommé par cette combustion principale va être transféré dans la zone de mélange en aval du front de flamme M^b où une chimie simplifiée va prendre place et modéliser la formation des NO_x, du CO et des suies. Le modèle, par son formalisme, permet également de rendre compte de tous les modes de combustion se produisant lors d'une combustion Diesel, bien que la modélisation de la flamme de diffusion reste proche des modèles évoqués préalablement. ECFM-3Z est en constante évolution, le modèle dédié à la post-oxydation ayant été récemment revu [73].
L'avantage de ce modèle est sa robustesse et sa capacité à traiter tous les modes de combustion tout en étant aisément extensible à la LES en intégrant le modèle ECFM-LES [153] et le modèle d'allumage AKTIM-Euler [153]. Néanmoins, la prise en compte du mélange est simplifiée, du fait de la discrétisation de la cellule en trois zones. D'autre part, la cinétique de la flamme de diffusion est décrite par des temps caractéristiques de mélange des zones de réactifs purs vers la zone de mélange en aval du front de flamme puis par un temps chimique très court. Ce modèle est largement améliorable, comme cela est montré par des travaux récents dédiés à la modélisation de la flamme de diffusion instationnaire [101].

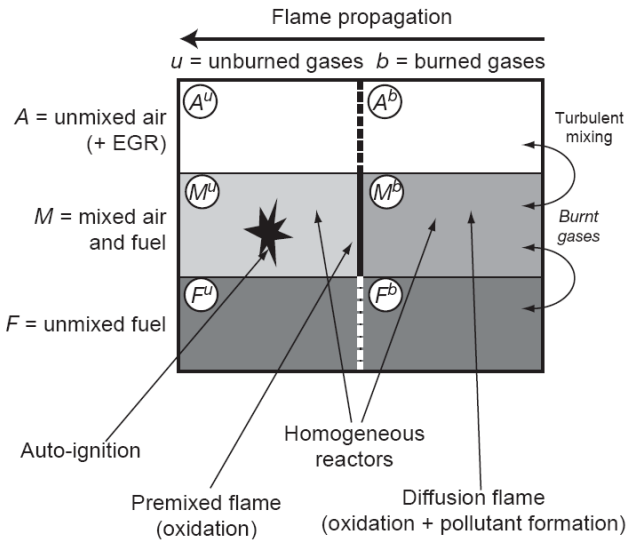


Fig. 1.6 – Représentation de la décomposition d'une cellule du domaine de calcul par le modèle ECFM-3Z.

Finalement, quelques points communs apparaissent pour les modèles adaptés au moteur :

- la flamme de prémélange est traitée au travers du transport d'une quantité représentative du front de flamme (densité de surface de flamme ou champ de G) ;
- les cinétiques des combustions en flamme de diffusion sont pilotées par des temps caractéristiques dont l'évaluation peut être remise en question ;
- la modélisation de l'auto-inflammation est réalisée par la prise en compte des effets de chimie complexe ou plus simplement au moyen de schémas cinétiques réduits. Ce dernier procédé est le plus contestable car il est difficile d'assurer la validité de la cinétique chimique réduite pour toutes les conditions thermodynamiques et chimiques rencontrées en moteur ;
- leur extension à la LES ne semble pas poser de problème.

Parmi ces modèles, ECFM-3Z apparait comme un des modèles les plus attractifs, étant donné qu'il rend compte de tous les modes de combustion et que son utilisation est répandue dans le monde industriel, ce qui prouve sa robustesse. Il semble donc intéressant de proposer un formalisme identique dans un contexte LES d'autant qu'il existe déjà un modèle pour l'équation de transport de la densité de surface de flamme dans ce cadre (ECFM-LES). Cependant, les descriptions du mélange et de la flamme de diffusion restent à améliorer.

1.4 Choix de modélisation

Les divers concepts de modélisation de la combustion dans un cadre LES ainsi que les modèles moteur existants actuellement ont été présentés. Chaque approche a ses avantages et ses inconvénients : les modèles moteur ont généralement un formalisme plus rigide mais une structure robuste qui permet de représenter tous les modes de combustion. Les modèles “mono-mode” LES comme PCM-FPI ont une structure assez modulaire mais doivent être adaptés pour décrire l'ensemble des modes de combustion rencontrés en moteur. Deux pistes sont donc suivies dans cette thèse :

- une première solution serait de proposer une adaptation du modèle ECFM-3Z à un contexte LES, tout en gardant à l'esprit la nécessité de lever quelques limitations comme la description de la chimie et des flammes de diffusion. Le point de départ est fourni par le modèle ECFM-LES, auquel sont attachés une décomposition bimodale de la cellule en terme de niveau d'avancement et une équation de transport pour la densité de surface de flamme. Des améliorations pour la description de la chimie en aval du front de flamme sont proposées et testées au chapitre 3. Le chapitre 4 est dédié à l'intégration du modèle d'allumage AKTIM-Euler au modèle obtenu et à l'étude de ce couplage. De façon analogue au formalisme du modèle ECFM-3Z, l'auto-inflammation se produisant en amont du front de flamme est décrite par le modèle TKI, l'intégration de ce modèle et les tests correspondant étant décrits au chapitre 5. Enfin, des propositions d'extensions théoriques au modèle global pour le traitement de combustions en milieu stratifié en richesse sont proposées au chapitre 6 en s'inspirant du modèle ADF-PCM. Le modèle I est ainsi obtenu.

- Une autre démarche permettant de répondre à la problématique de la thèse consiste à reprendre le formalisme modulaire de PCM-FPI, en essayant de proposer une alternative aux modélisations actuelles de la flamme de prémélange et d'intégrer une modélisation de l'allumage par bougie. Ainsi, au chapitre 3, un modèle couplant l'équation de densité de surface de flamme de ECFM-LES et le modèle PCM-FPI permet de contrôler la vitesse de flamme turbulente tout en intégrant les effets de chimie complexe pour la prédiction des espèces chimiques. De même que pour le modèle I, un couplage est proposé avec le modèle d'allumage AKTIM-Euler puis testé au chapitre 4. Ce modèle est ensuite couplé avec le modèle PCM-FPI pour la description de l'auto-inflammation, la fonctionnalité de ceci étant également mise en avant au chapitre 5. Enfin, le modèle est étendu par la prise en compte des stratifications en richesse de sous-maille au chapitre 6, ce qui correspond au modèle II.

Les modèles I et II sont résumés au travers du schéma de la figure 1.7.

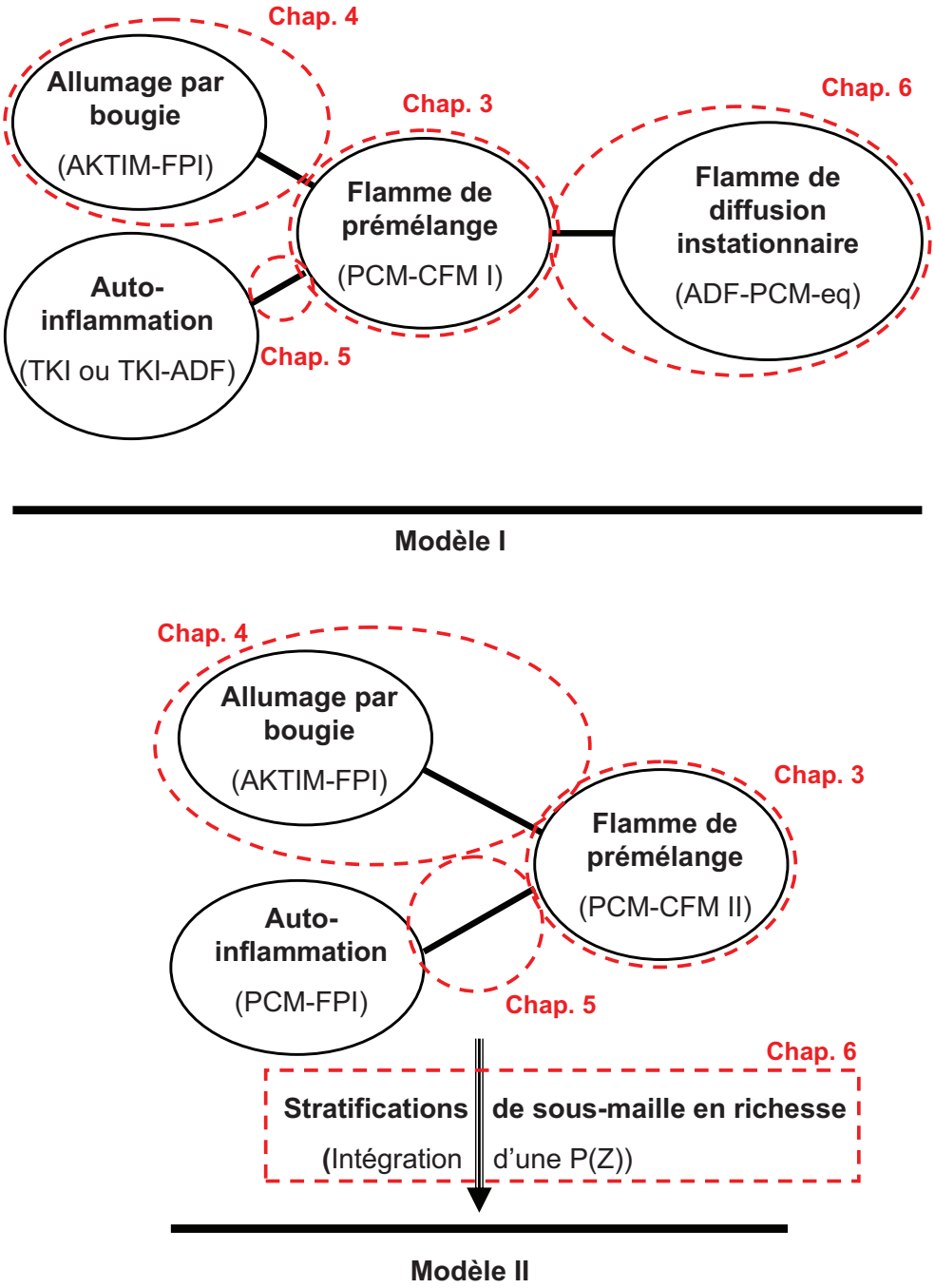


FIG. 1.7 – Résumé des modes d'obtention des modèles génériques I et II.

1.5 Conclusion

Ce chapitre a tout d'abord permis de présenter des notions de base liées à la combustion au travers de la présentation des modes de combustion élémentaires et des équations de l'aérothermochimie.
De celles-ci ont été déduites les équations filtrées qui sont résolues lors de la réalisation de calculs LES et qui font apparaître des termes à fermer comme ceux rendant compte du transport turbulent et les taux de réaction filtrés.
La problématique spécifique de la modélisation du transport turbulent pour la flamme de prémélange est abordée au chapitre 2. La modélisation des taux de réaction filtrés a en revanche été détaillée ici. Cette thèse étant une contribution à l'obtention d'un modèle générique destiné au calcul LES moteur, les modèles de combustion de référence pour tous les modes de combustion utilisés lors de calculs LES ont été détaillés. Il est ressorti que PCM-FPI constituait un des meilleurs candidats parmi l'existant pour répondre à la problématique de la thèse, puisqu'il intègre les effets de chimie complexe et a été employé pour l'étude de nombreux modes de combustion à des coûts CPU raisonnables. Cependant, quelques inconvénients associés à ce modèle ont été rappelés.
Des modèles de la littérature exploités pour des calculs moteur ont ensuite été explicités. Ceux-ci présentaient globalement des formalismes robustes mais pouvaient fournir des descriptions trop simples de la chimie et de la combustion en flamme de diffusion.
Des stratégies d'obtention de nouveaux modèles génériques ont ensuite été proposées. Il serait tout d'abord possible de s'inspirer du modèle moteur ECFM-3Z, qui rend compte de tous les modes de combustion, et de l'étendre à la LES en se basant sur l'équation de transport de la densité de surface de flamme (modèle ECFM-LES). D'autre part, le formalisme modulaire de PCM-FPI s'avère attirant et une seconde démarche d'élaboration d'un modèle générique consisterait à s'inspirer de PCM-FPI tout en levant quelques-unes de ses limitations.

Chapitre 2

Fermeture du transport non résolu pour les flammes prémélangées en LES

Ce chapitre aborde le choix de la fermeture pour le transport non résolu qui apparaît lors de l'opération de filtrage de l'équation de transport de la variable d'avancement. Bien souvent, ce travail de fermeture est négligé en supposant que la majeure partie du transport turbulent est résolue par la LES. Ceci reste vrai pour des maillages suffisamment fins et suppose que l'utilisateur dispose de puissantes machines de calcul. Ces contraintes n'étant pas toujours satisfaites, il apparaît prudent de s'assurer d'un bon choix de fermeture puisque la vitesse de propagation du front turbulent provient d'un déséquilibre entre le taux de réaction et le transport non résolu.
Le travail qui a été réalisé dans la thèse à ce sujet, a fait l'objet d'une communication orale lors du 6*th Mediterranean Symposium on Combustion* 2009 après acceptation de l'article inséré ci-après. D'autre part, celui-ci a été sélectionné pour publication dans la revue *Combustion Science and Technology*.

2.1 Abstract

This paper concerns the modelling of unresolved turbulent fluxes in premixed flames. Classically closed with a gradient assumption, this term may also contain a counter-gradient part as detailed in other works. In a first section, the bibliographical resources giving details about the closure of the unresolved turbulent fluxes are investigated and confronted thanks to time-averaged DNS databases. LES are then performed to underline the possibility to integrate the counter-gradient transport in an industrial-like computation where the mesh may not be thin enough to capture all the turbulent transport at a resolved scale. Results given by the considered closures are compared with experimental points and analyzed.

2.2 Introduction

Dealing with turbulent premixed flames and specifically with the turbulent transport term may lead to study the counter-gradient transport (CGDT) phenomenon. It has been notably observed in experiments by Moss [105], Armstrong *et al.* [5] and more recently by Chen *et al.* [33] and Pfadler *et al.* [124, 123]. In the modelling domain, DNS was proved to be a useful tool to highlight and quantify the CGDT (Rutland et Cant [137], Trouvé *et al.* [151], Boger *et al.* [12], Boughanem et Trouvé [16] and Domingo *et al.* [41]). It emerges that the CGDT closure is a tricky issue in a RANS framework as it is entirely modelled whereas LES should capture a part of CGDT at the resolved level. However, results of Boger *et al.* [12] based on spatially filtered DNS showed that using a large filter size may results in unresolved transport levels close to those observed in RANS. These considerations should be integrated in the domain of use of the LES today on industrial configurations. In fact, such computations rely on coarse meshes, which may not be sufficient to capture all the turbulent transport at the resolved level. First, the present work aims at comparing several unresolved transport models proposed in the literature including gradient and counter-gradient transport using simple *a priori* comparisons. These models are then implemented in the AVBP solver [108] to perform 3-D LES of a lean premixed turbulent swirl burner. The closures quantifying unresolved turbulent transport are confronted with some experimental results and the extent of counter-gradient diffusion is investigated.

2.3 Filtered progress variable transport equation

In the theory of premixed flames, assuming a single step chemistry and a unity Lewis number, the mass fractions of the reactive species and the temperature are linearly related and may be expressed with a reaction progress variable c (c=0 within fresh reactants and c=1 within burnt products). The balance equation for the progress variable can be written as [12] :

$$\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} c) = \nabla \cdot (\rho D \nabla c) + \rho \dot{\omega}_c = \rho \omega |\nabla c| \tag{2.1}$$

where ρ,$\mathbf{u}$,D,$\dot{\omega}_c$ and ω denote the density, the velocity vector, the molecular diffusivity, the reaction rate and the displacement speed of the iso-c level relative to the flow.
Applying a LES filter, this equation becomes :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \overline{\rho \omega |\nabla c|} \tag{2.2}$$

$\bar{Q}$ and $\tilde{Q} = \overline{\rho Q}/\bar{\rho}$ are the well-known Reynolds and Favre filters. The three LHS terms in Equation (2.2) correspond respectively to unsteady effects, resolved convective fluxes and unresolved transport, while $\overline{\rho \omega |\nabla c|}$ is a source term, which can be expressed as a function of the spatially filtered flame surface density $\overline{\Sigma}$ [150] :

$$\overline{\rho \omega |\nabla c|} = \rho^u S_L \overline{\Sigma} = \rho^u S_L \Xi |\nabla \bar{c}| \tag{2.3}$$

where ρ^u, S_L and Ξ denote the fresh gases density, the laminar flame speed and the sub-grid scale wrinkling. To close Equation (2.2) both turbulent transport and filtered flame surface density have to be modelled. Accordingly, the paper focuses on these two terms.

2.4 Models for the turbulent transport

Usually, a simple gradient expression is assumed to model the unresolved turbulent flux :

$$\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c} = \bar{\rho}\left(\widetilde{\mathbf{u}c} - \tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}\right) = -\bar{\rho}\frac{\nu_T}{Sc_T}\nabla\tilde{c} \tag{2.4}$$

where μ_T is the turbulent viscosity and Sc_T a turbulent Schmidt number (here Sc_T=1) However, assuming a laminar steady 1-D flame and considering the mass conservation through the flame $\rho u = \rho^u S_L$, Boger [10] showed the existence of an unresolved laminar flux :

$$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \rho^u S_L(\bar{c} - \tilde{c}) \tag{2.5}$$

$\bar{c}$ being greater than $\tilde{c}$, this flux is clearly non-gradient and is often related to counter-gradient transport (CGDT). Considering a bimodal flame structure, the two averages $\bar{c}$ and $\tilde{c}$ are related by $\bar{c} = (1+\tau)\tilde{c}/1+\tau\tilde{c}$ [25] and Equation (2.5) becomes :

$$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \rho^u S_L \tau \frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{1+\tau\tilde{c}} \tag{2.6}$$

where τ is the thermal expansion rate across the flame. Using the BML expression for the filtered density, Equation (2.6) reads :

$$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}\tau\tilde{c}(1-\tilde{c}) \tag{2.7}$$

and the expression proposed by Veynante *et al.* [158] or Rymer [138] for RANS simulation is recovered.

2.4.1 RANS formulation

Starting from Equation (2.7) in the laminar case, Rymer then proposed to express the total unresolved transport flux as :

$$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}\tau\tilde{c}(1-\tilde{c}) - \bar{\rho}\nu_T|\nabla\tilde{c}| \tag{2.8}$$

Expressing $|\nabla\tilde{c}|$ as $|\nabla\tilde{c}| = 4\tilde{c}(1-\tilde{c})/\delta_B$ [158], where δ_B is the turbulent flame brush thickness, Equation (2.8) becomes :

$$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}\left(\tau S_L - 4\frac{\nu_T}{\delta_B}\right)\tilde{c}(1-\tilde{c}) \tag{2.9}$$

and the expression proposed by Veynante *et al.* [158] is recovered : $\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}(2\alpha u^{'} - \tau S_L)\tilde{c}(1-\tilde{c})$, with $\alpha = 2\mu_T/\delta_B u^{'}$. In a RANS framework, the turbulent viscosity may be written as $\nu_T = C_R u^{'} l_T$ (with C_R=0.36) and α the becomes $\alpha = 2C_R l_T/\delta_B$. Considering that the integral length scale is close to the turbulent flame brush thickness in RANS, Equation (2.9) can finally be rewritten as :

$$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}(\tau S_L - 4C_R u^{'})\tilde{c}(1-\tilde{c}) \tag{2.10}$$

2.4.2 LES formulation

In LES, using an analogy to the Smagorinsky model [134], ν_T may be expressed as $\nu_T = C_L u'_\Delta \Delta$ (with C_L=0.12) and $|\nabla\tilde{c}|$ can be written as : $|\nabla\tilde{c}| = 4\tilde{c}(1-\tilde{c})/\Delta$ [133], where Δ is the LES combustion filter size. The unresolved c-flux expression the becomes :

$$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}(\tau S_L - 4C_L u'_\Delta)\tilde{c}(1-\tilde{c}) \tag{2.11}$$

This expression can be generalized to multi-D configurations including an orientation factor [134, 133]. For this purpose, Equation (2.8) is rewritten as :

$$\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c} = -\rho^u S_L(\bar{c}-\tilde{c})\bar{\mathbf{n}} - \bar{\rho}\nu_T\nabla\tilde{c} \tag{2.12}$$

where $\bar{\mathbf{n}} = -\nabla\bar{c}/|\nabla\bar{c}| = -\nabla\tilde{c}/|\nabla\tilde{c}|$ is the normal to the iso-surface of the resolved progress variable. Hence, the unresolved transport can be expressed as :

$$\nabla\cdot(\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \rho^u S_L\left(|\nabla\bar{c}| - |\nabla\tilde{c}| - (\bar{c}-\tilde{c})\nabla\cdot\bar{\mathbf{n}}\right) - \nabla\cdot(\bar{\rho}\nu_T\nabla\tilde{c}) \tag{2.13}$$

and Equation (2.2) finally becomes :

$$\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{c}}{\partial t} + \nabla\cdot(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \nabla\cdot(\bar{\rho}\nu_T\nabla\tilde{c}) + \rho^u S_L\left(\overline{\Sigma} - |\nabla\bar{c}| + |\nabla\tilde{c}| + (\bar{c}-\tilde{c})\nabla\cdot\bar{\mathbf{n}}\right) \tag{2.14}$$

Contrary to Richard [134, 133] who keeps a laminar expression for the unresolved transport (Eq. (2.12)), Boger [10] and Weller *et al.* [163] suppose a dependency to the flame wrinkling in the turbulent regime :

$$\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c} = -\rho^u S_L \Xi(\bar{c}-\tilde{c})\bar{\mathbf{n}} - \bar{\rho}\nu_T\nabla\tilde{c} \tag{2.15}$$

In this case, the 1-D c-transport equation then reads :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\bar{\rho}\tilde{c}}{\partial t} + \nabla\cdot(\bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c}) &= \nabla\cdot(\bar{\rho}\nu_T\nabla\tilde{c}) + \rho^u\Xi S_L\left(-|\nabla\bar{c}| + |\nabla\tilde{c}|\right) + \rho^u S_L\overline{\Sigma} \\ &= \nabla\cdot(\bar{\rho}\nu_T\nabla\tilde{c}) + \rho^u\Xi S_L|\nabla\tilde{c}|\end{aligned} \tag{2.16}$$

which corresponds to Zimont 1-D ISP Flame model [166, 167]. The proposed turbulent flux can be rewritten as :

$$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}\left(4C_L - \tau S_L\left(\frac{1}{u'_\Delta} + \frac{1}{S_L}\right)\right)u'_\Delta\tilde{c}(1-\tilde{c}) \tag{2.17}$$

For low values of u'_Δ, counter-gradient transport should then be obtained, while for high values of u'_Δ, the gradient/counter-gradient nature does not depend on u'_Δ anymore, but only on the thermal expansion rate level. This last result is in good agreement with some DNS of Boger [12, 10], showing that an increase of the filter size (*i.e.* of u'_Δ) for a given value of total turbulence u', leads to an increase of the resolved transport level (gradient for low levels of τ and counter-gradient for high levels of τ). However, the Ξ-dependency (Eq. (2.15)) can lead to an overestimation of the counter-gradient transport [124] and still has to be proven.
Both expressions (2.12) and (2.15) can theoretically be used in 3-D CFD codes to account for CGDT in large-edy simulations. Unfortunately, counter-gradient transport is by nature

anti-diffusive and its implementation often leads to numerical difficulties in CFD codes. Such terms are therefore rarely used in simulations. In the literature, only Weller accounted for this effect, but he did not discuss the impact of CGDT in his calculation. From the author's experience, the formulation proposed by Richard [133] in Equation (2.14) has never been tested in the literature, although it is more convenient than the one proposed by Rymer or Veynante (Eq. (2.8)) as it is not explicitly anti-diffusive. For this reason, this formulation has been retained in this work to implement both models proposed by Richard *et al.* and Boger *et al.* (Table 2.1) in the AVBP LES solver [108]. The present paper aims at comparing these two approaches to the classical gradient formulation using simple *a priori* comparisons but also 3-D LES of a lean premixed turbulent swirl-burner. For this purpose, four closures of Equation (2.2) are studied :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \nabla \cdot (\bar{\rho}\nu_T \nabla \tilde{c}) + \rho^u S_L \overline{\Sigma} \tag{2.18}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \nabla \cdot (\bar{\rho}\nu_T \nabla \tilde{c}) + \rho^u S_L \left(\overline{\Sigma} - |\nabla \bar{c}| + |\nabla \tilde{c}| + (\bar{c} - \tilde{c})\nabla \cdot \bar{\mathbf{n}}\right) \tag{2.19}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \nabla \cdot (\bar{\rho}\nu_T \nabla \tilde{c}) + \rho^u S_L \left(\overline{\Sigma} - \Xi\left(|\nabla \bar{c}| - |\nabla \tilde{c}| - (\bar{c} - \tilde{c})\nabla \cdot \bar{\mathbf{n}}\right)\right) \tag{2.20}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho}\tilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}) = \nabla \cdot (\bar{\rho}\nu_t \nabla \tilde{c}) + \rho^u S_l \overline{\Sigma}_{\tilde{c}} \tag{2.21}$$

where $\Xi = \overline{\Sigma}/|\nabla \bar{c}|$ and $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}} = \overline{\Sigma} - |\nabla \bar{c}| + |\nabla \tilde{c}| + (\bar{c} - \tilde{c})\nabla \cdot \bar{\mathbf{n}}$.
The first one corresponds to the simple gradient approach classically used in the literature, while the others represent different ways to account for CGDT and are discussed in the next Section.

Tab. 2.1 – Summary of the unresolved turbulent transport formulations.

c-equation model	Reference	Unresolved c-flux expression	Dim.
A	Classical gradient approach	$\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c} = -\bar{\rho}\nu_T \nabla \tilde{c}$	$3D$
-	Veynante *et al.* [158]	$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}(2\alpha u' - \tau S_l)\tilde{c}(1 - \tilde{c})$	$1D$
B and D	Rymer [138] Richard *et al.* [134, 133]	$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = \bar{\rho}\tau\tilde{c}(1 - \tilde{c}) - \bar{\rho}\nu_T\lvert\nabla \tilde{c}\rvert$ $\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c} = -\rho^u S_L(\bar{c} - \tilde{c})\bar{\mathbf{n}} - \bar{\rho}\nu_T \nabla \tilde{c}$	$1D$ $3D$
C	Zimont [166] Boger [10], Weller *et al.* [163]	$\overline{\rho u c} - \bar{\rho}\tilde{u}\tilde{c} = -\rho^u \Xi S_L\lvert\nabla \tilde{c}\rvert - \bar{\rho}\nu_T\lvert\nabla \tilde{c}\rvert$ $\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c} = -\rho^u S_L \Xi(\bar{c} - \tilde{c})\bar{\mathbf{n}} - \bar{\rho}\nu_T \nabla \tilde{c}$ $= -\bar{\rho}\tau S_L \Xi \bar{\mathbf{n}} - \bar{\rho}\nu_T \nabla \tilde{c}$	$1D$ $3D$

2.5 Flame surface density modelling

In this paper, all the simulations are performed using a transport equation for the filtered flame surface density (FSD). As pointed out in [16], one of the advantage of such an

equation is that it provides good predictions of the turbulent flame speed when compared to algebraic models, even in unsteady cases, a key point according to Driscoll [45]. For this purpose, the transport equation proposed by Richard [133] for the Reynolds filtered FSD is used :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\overline{\Sigma}}{\partial t}+\nabla.(\tilde{\mathbf{u}}\overline{\Sigma}) &= (\nabla\cdot\tilde{\mathbf{u}}-\overline{\mathbf{n}\mathbf{n}}:\nabla\tilde{\mathbf{u}})\overline{\Sigma}-\nabla.(S_D\bar{\mathbf{n}}\overline{\Sigma})+S_D(\nabla\cdot\bar{\mathbf{n}})\overline{\Sigma}\\ &+\nabla\cdot\left(\frac{\nu_t}{Sc_T}\nabla\overline{\Sigma}\right)+\Gamma\left(\frac{u'_{\hat{\Delta}}}{S_L},\frac{\Delta}{\delta_L}\right)\frac{u'_{\hat{\Delta}}}{\hat{\Delta}}\overline{\Sigma}\\ &+\beta_c S_L\frac{c^*-\bar{c}}{\bar{c}(1-\bar{c})}(\overline{\Sigma}-|\nabla\bar{c}|)\overline{\Sigma}\end{aligned}\tag{2.22}$$

where $S_D=(1+\tau\tilde{c})S_L$, Γ is the efficiency function proposed by Charlette *et al.* [31], δ_L is the laminar flame thickness and c^*=0.4 is a constant.

When coupled to Equation (2.18), this equation leads to a classical CFM model similar to those used in the literature for RANS [47, 35] and LES [65, 66]. In this case, no CGDT is accounted for and the source term of the c-equation which is related to $|\nabla\bar{c}|$ is not fully coherent with the transport progress variable $\tilde{c}$. On the contrary, combining Equation (2.19) or (2.20) and Equation (2.22) leads to consistent formulations with two different expressions for the CGDT term. Finally, Equation (2.21) differs from Equation (2.19) by the way the source term is expressed. In this case, CGDT is directly included in a new quantity noted $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$. This last quantity is then transported using an Equation proposed in [134] and which is quite similar to Equation (2.22) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}}{\partial t}+\nabla.(\tilde{\mathbf{u}}\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}) &= (\nabla\cdot\tilde{\mathbf{u}}-\overline{\mathbf{n}\mathbf{n}}:\nabla\tilde{\mathbf{u}})\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}-\nabla.(S_D\bar{\mathbf{n}}\overline{\Sigma}_{\tilde{c}})+S_D(\nabla\cdot\bar{\mathbf{n}})\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}\\ &+\nabla\cdot\left(\frac{\nu_t}{Sc_T}\nabla\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}\right)+\Gamma\left(\frac{u'_{\hat{\Delta}}}{S_L},\frac{\Delta}{\delta_L}\right)\frac{u'_{\hat{\Delta}}}{\hat{\Delta}}\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}\\ &+\beta_c S_L\frac{c^*-\bar{c}}{\bar{c}(1-\bar{c})}(\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}-|\nabla\tilde{c}|+(\bar{c}-\tilde{c})\nabla\cdot\bar{\mathbf{n}})\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}\end{aligned}\tag{2.23}$$

Closures of the source terms of this equation are adapted to obtain a correct behaviour in the laminar regime. Notably, when $u'_{\hat{\Delta}}\rightarrow 0$, $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}\rightarrow|\nabla\tilde{c}|+(\bar{c}-\tilde{c})\nabla\cdot\bar{\mathbf{n}}$ and the unresolved laminar flux expression is recovered. In addition, it can be shown using a KPP analysis [133] that this equation ensures the same turbulent flame speed than Equation (2.22). It can also be noted that the total flame surface is unchanged when compared to Equation (2.21) as $\int_\Omega -|\nabla\bar{c}|+|\nabla\tilde{c}|+(\bar{c}-\tilde{c})\nabla\cdot\bar{\mathbf{n}}dV=0$. In conclusion, Equation (2.21) simply allows to implicitly account for CGDT via a transport equation for the sum of the source term and the laminar unresolved transport. This model has the advantage of being very easy to implement in most of the CFD codes as it only requires slight modifications of the FSD transport equation source terms.

2.6 *A priori* comparisons

Direct numerical simulation (DNS) is an interesting tool to develop and validate LES models. In this paper, DNS from Boger *et al.* [12] and Veynante *et al.* [158] are used

to evaluate different unresolved transport models. These direct simulations concern the propagation of an initially planar laminar flame in a decaying homogeneous and isotropic turbulence (HIT). The flame is progressively wrinkled by the different structures of the flow and *a posteriori* RANS and LES analysis are performed to quantify the turbulent transport of the progress variable and determine its nature. Among all the simulations present in the DNS databases, two parametric variations are retained : the first one correspond to simulations with a variable heat release parameter [12] : τ=0.5,2,6, while the second one is focused on the initial turbulence intensity influence [158] : $u^{'}/S_L$=2,3,5,10. Both studies allow to highlight transitions between counter-gradient and gradient turbulent transport regimes. In the present work, RANS values obtained by time-averaging the DNS quantities are used to perform *a priori* comparisons between the turbulent c-flux predicted by the different closures presented in Table 2.1. It can be noted that the expression proposed by Veynante *et al.* is equivalent to the one given by Rymer or Richard *et al.* (Table 2.1) provided that a good value of α is chosen (see Eq. (2.10) and (2.11)). Then only the second expression will be tested in this study. It is also important to note that comparisons with RANS results should be made with care for several reasons :

- the turbulence intensity decreases in the DNS while a fixed value of $u^{'}$ is used in the author's tests.

- quantities like S_L vary in the DNS when changing τ while they are unchanged in the proposed predictions.

Consequently the following discussion will focus on the trends and levels of the turbulent transport.

Figure 2.1 shows the results obtained for a variation of the thermal expansion rate τ. In the DNS (a), when increasing this parameter, the turbulent c-flux nature clearly changes from gradient (GD) to counter-gradient (CGD). This trend seems to be correctly predicted using the Richard *et al.* (c) and Boger *et al.* expressions (d) but this last model overestimates the counter-gradient contribution, as already observed by Pfadler [124]. Naturally, the classical gradient approach always gives a gradient-type c-flux and is not adapted to account for the GD/CGD transition.
Results obtained for an increase of the turbulence intensity are presented in Figure 2.2. Direct simulations (a) show a modification of the turbulent c-flux nature from GD to CGD when decreasing the level of $u^{'}$. This trend is once again well predicted using the Richard *et al.* expression (c) but is not reproduced by the Boger *et al.* model (d), which always predicts CGD transport and leads to an increase of this transport with $u^{'}$. The classical gradient approach (b) always furnishes a GD-type transport but gives accurate levels for high $u^{'}$ values.
Finally, the Richard *et al.* model appears as a good candidate to account for GD/CGD transport transitions, but it should be noted that it does not allow to reproduce the turbulent c-flux distribution along the c-axis. In the DNS, the turbulent transport type is always GD at the leading edge of the flame, while the model always depicts, by nature, a parabolic shape.

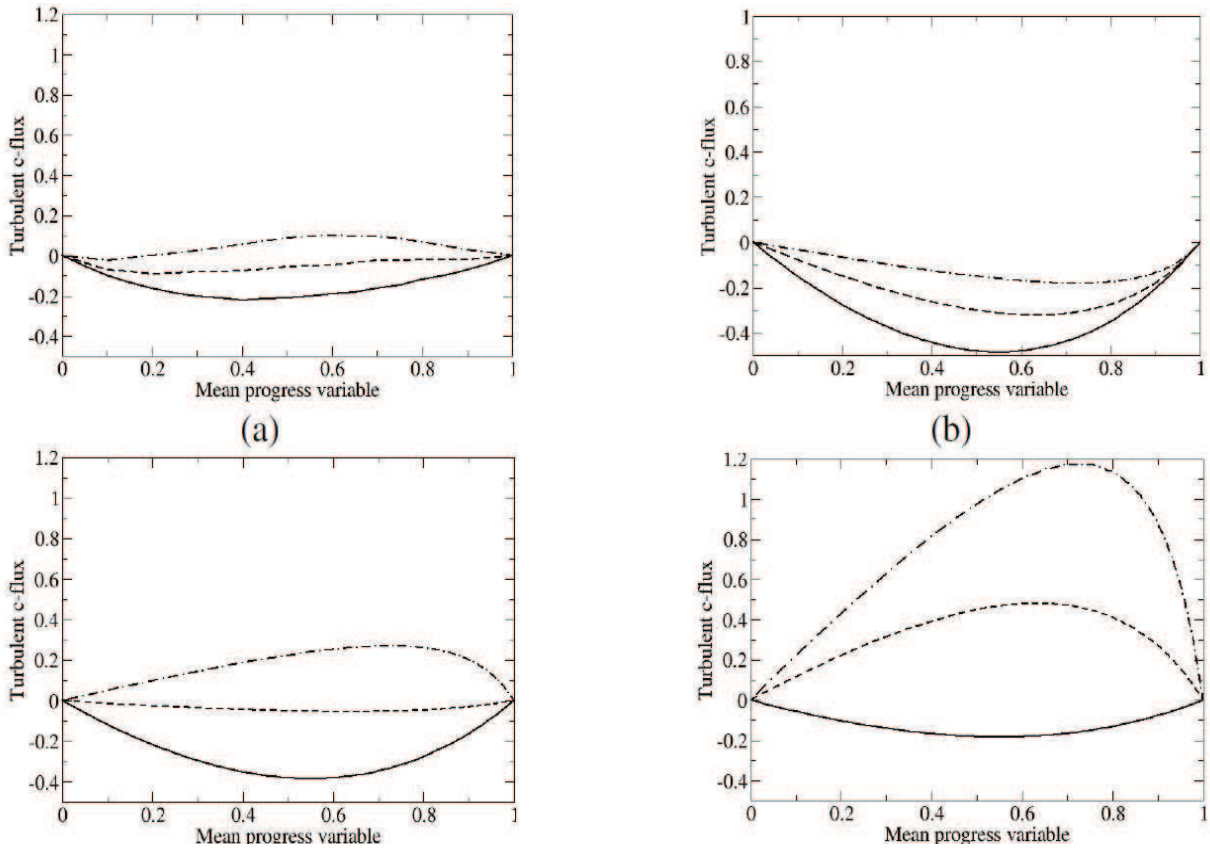


FIG. 2.1 – Comparison between the turbulent flux $\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}$ obtained by time-averaging DNS quantities from Boger *et al.* [12, 10] (a) and by different closures (Table. 2.1) : classical gradient approach (b), model from Richard (c), model of Boger or Weller (d). The turbulent c-flux is plotted as a function of $\bar{c}$ for different values of τ : — τ=0.5, --- τ=2 and -.- τ=6.

2.7 LES of a lean premixed turbulent swirl-burner

In this Section, the four closures proposed in Equations (2.18) to (2.21) are tested by applying them in a LES of an experimentally studied turbulent premixed flame.

2.7.1 Experimental set-up

The experiment considered here is the well documented PRECCINSTA swirl burner [97]. An associated scheme may be seen in Figure 2.3.a : an air flow crosses the plenum and goes through a swirler where methane is injected, giving a global equivalence ratio of 0.83. The mixture is assumed to occur so quickly that a perfect mixing enters the combustion chamber. Mass fractions of chemical species and temperature were measured via laser Ràmàn scattering (the locations of the corresponding probe lines are shown in Fig. 2.3.b).

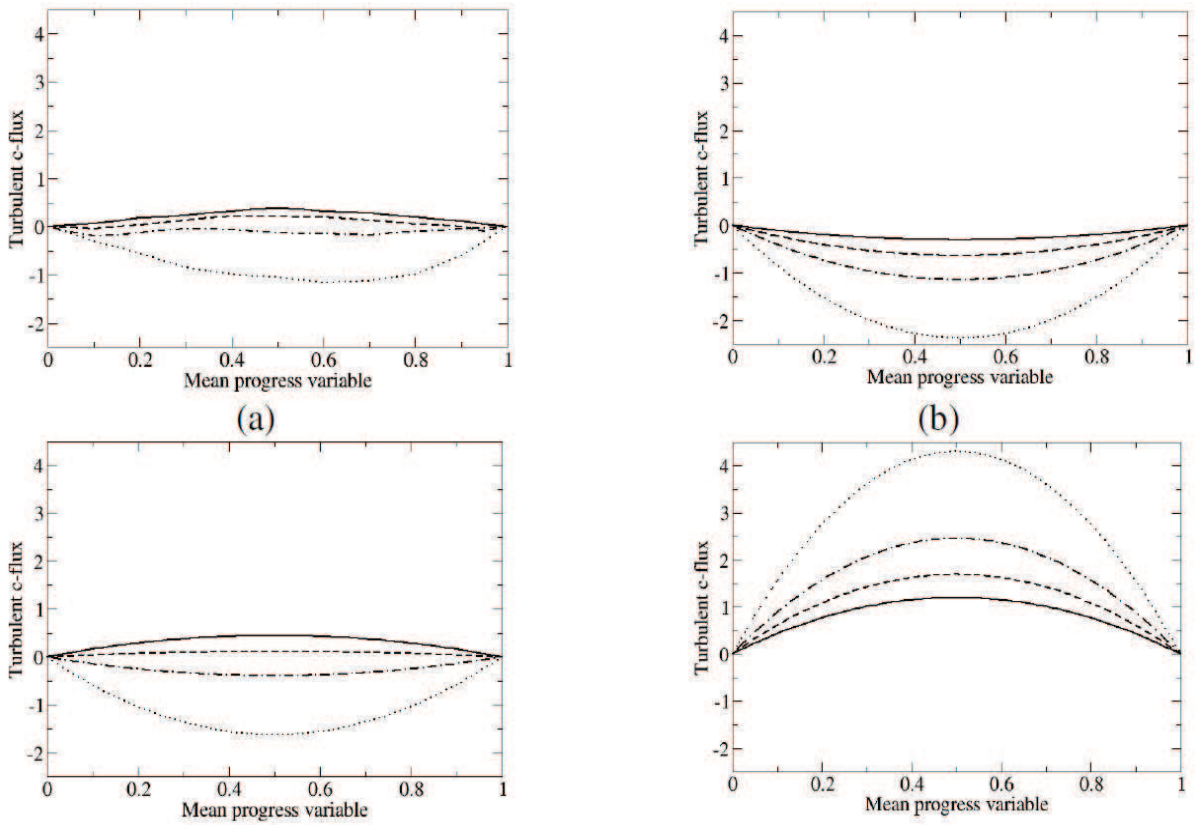


FIG. 2.2 – Comparison between the turbulent flux $\widetilde{\mathbf{u}c} - \tilde{\mathbf{u}}\tilde{c}$ obtained by time-averaging DNS quantities from Veynante *et al.* [158] (a) and by different closures (Table. 2.1) : classical gradient approach (b), model from Richard (c), model of Boger or Weller (d). The turbulent c-flux is plotted as a function of the mean progress variable $\tilde{c}$ for different values turbulent intensities : — u'/S_L=2, --- u'/S_L=3, -.- u'/S_L=5 and .... u'/S_L=10.

2.7.2 Results

The flame may be located thanks to the temperature, as shown in Figures 2.4 and 2.5, for the 4 closures considered here. The profiles of Figure 2.5.a show a good capture of the mean flame by models A, B and D. The thickness of the fresh gases pocket is slightly overestimated and the flame is too short for model C compared with the other formulations and the experimental points.

According to the work of Galpin *et al.* [59], the resolved RMS which are considered in Figure 2.5.b should stay below the experimental points as the size of the characteristic filter of measurements is a little bit smaller than the LES one. This is almost the case for models A, B and D whereas model C overestimates the temperature fluctuations in the burnt gases zones. However, model A, for which there is no counter-gradient contribution, gives quite small fluctuations compared to experiments and models B and D, especially close to the nozzle. This suggests that CGDT promotes instabilities of the flame.
Figure 2.5.b reveals very similar behaviours of models B and D which means that accounting for the counter-gradient flux explicitly or implicitly gives similar results. This is an important result because, as previously mentioned, integrating implicit counter-gradient

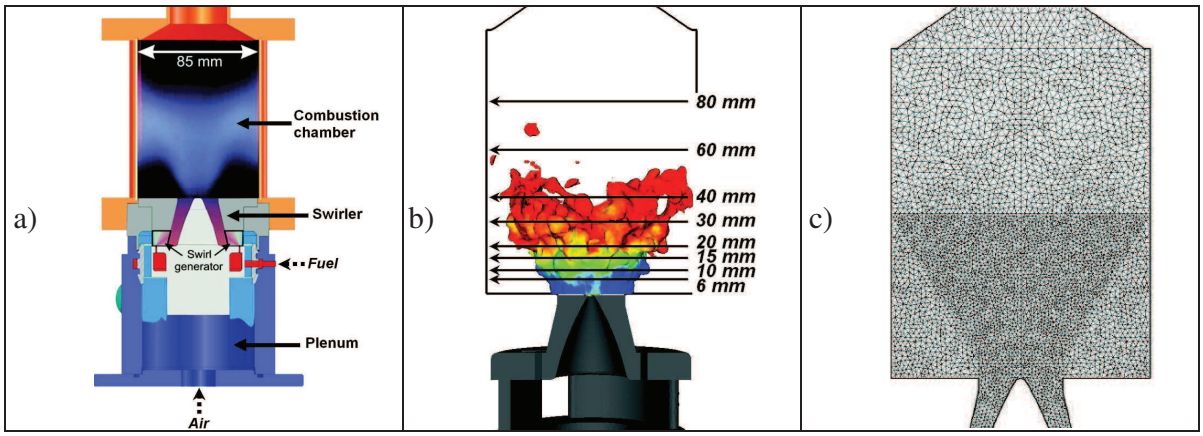


FIG. 2.3 – a) : Schematic of the experimental set-up. b) : Locations of the probe lines corresponding to measurements of chemical species. c) : Focus on the computational mesh.

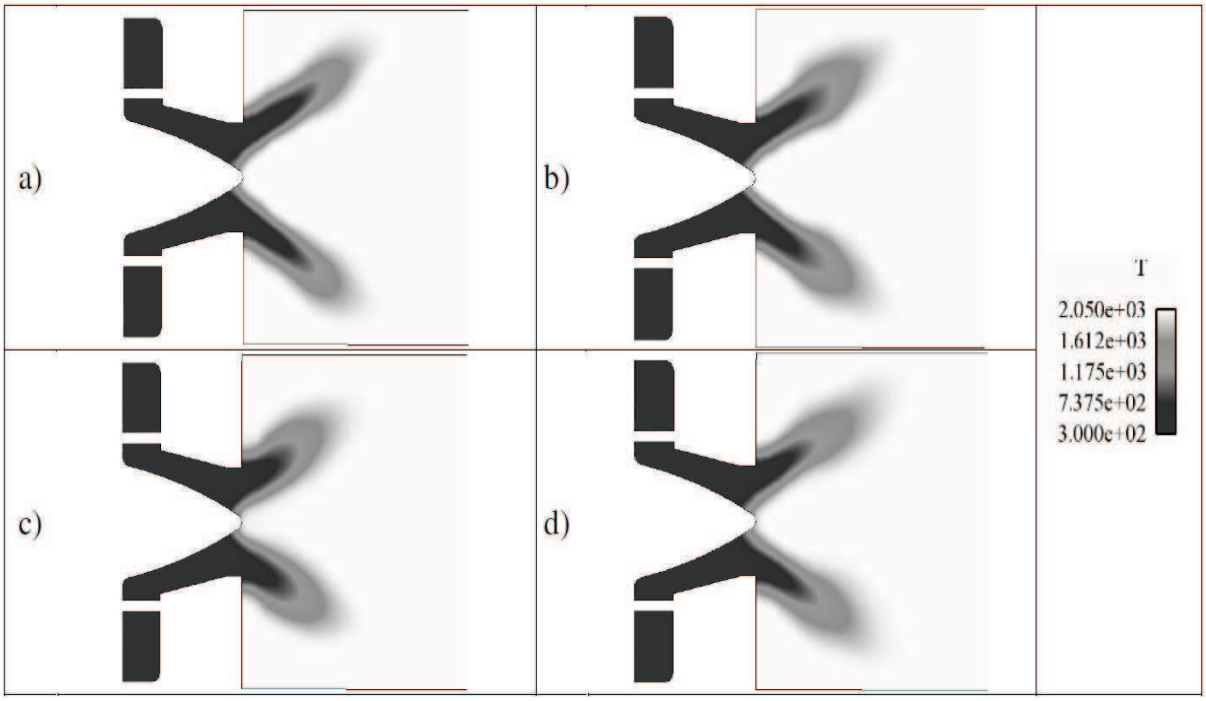


FIG. 2.4 – Contours of the mean temperature for a plane cutting the middle of the chamber. a) : Model A. b) : Model B. c) : Model C. d) : Model D.

transport is very straightforward and simply requires slight adaptations of the FSD transport equation source terms.
The profiles of the mean flame surface density $\overline{\Sigma}$ along the same locations as the ones exploited for the temperature are represented in Figure 2.6. The similar results obtained for models A, B and D, are explained by comparable orders of magnitude reached by the flame surface density. For model C, $\overline{\Sigma}$ is almost always larger than the same quantity for the other closures leading to a shorter flame.

Finally, models B and D which are based on the Richard *et al.* formulation for the turbulent transport (Table 2.1) give the best agreement with experimental data in terms of flame location, length and dynamics. Consequently the last part of this paper is dedicated to an analysis of the GD and CGD contributions obtained from these models. As both models give similar results in terms of turbulent transport (not shown), we focus on the results given by model B. For this purpose, two quantities are a posteriori computed :

– the mean of the closed unresolved turbulent flux : $\langle \rho^u S_L(\bar{c} - \tilde{c}) - \nu_T |\nabla \tilde{c}| \rangle$;

– the mean resolved turbulent flux, as presented in the PhD thesis of Boger [10], which projected on the direction normal to the flame front is written as :
$\left\langle \bar{\rho}\widetilde{\mathbf{u} \cdot \mathbf{n} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{n}}\tilde{c} \right\rangle^{Res} = \langle \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{n}}\tilde{c} \rangle - \langle \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{n}} \rangle \langle \tilde{c} \rangle - \langle \bar{\rho}\tilde{c} \rangle \langle \tilde{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{n}} \rangle + \langle \bar{\rho} \rangle \langle \tilde{c} \rangle \langle \tilde{\mathbf{u}} \cdot \bar{\mathbf{n}} \rangle$

At a resolved scale (see Figures 2.7.a and 2.7.b), the counter-gradient transport dominates along the leading edge and in the inner part of the flame front, whereas the resolved turbulent flux is weakly gradient in term of magnitude and distribution.
Nevertheless at the sub-grid scale the counter-gradient transport occurs mainly at the trailing edge of the flame where it roughly reaches the same magnitude as the resolved part. The gradient transport is noticeable in zones where recirculation of the flow may appear at given times.
The schematic of Figure 2.7.f identifies the gradient/counter-gradient transport zones. Going downstream the nozzle, the turbulent structures impact the reactive layer to create gradient transport zones and their influence further decrease in favour of the thermal expansion rate effect leading to counter-gradient transport.

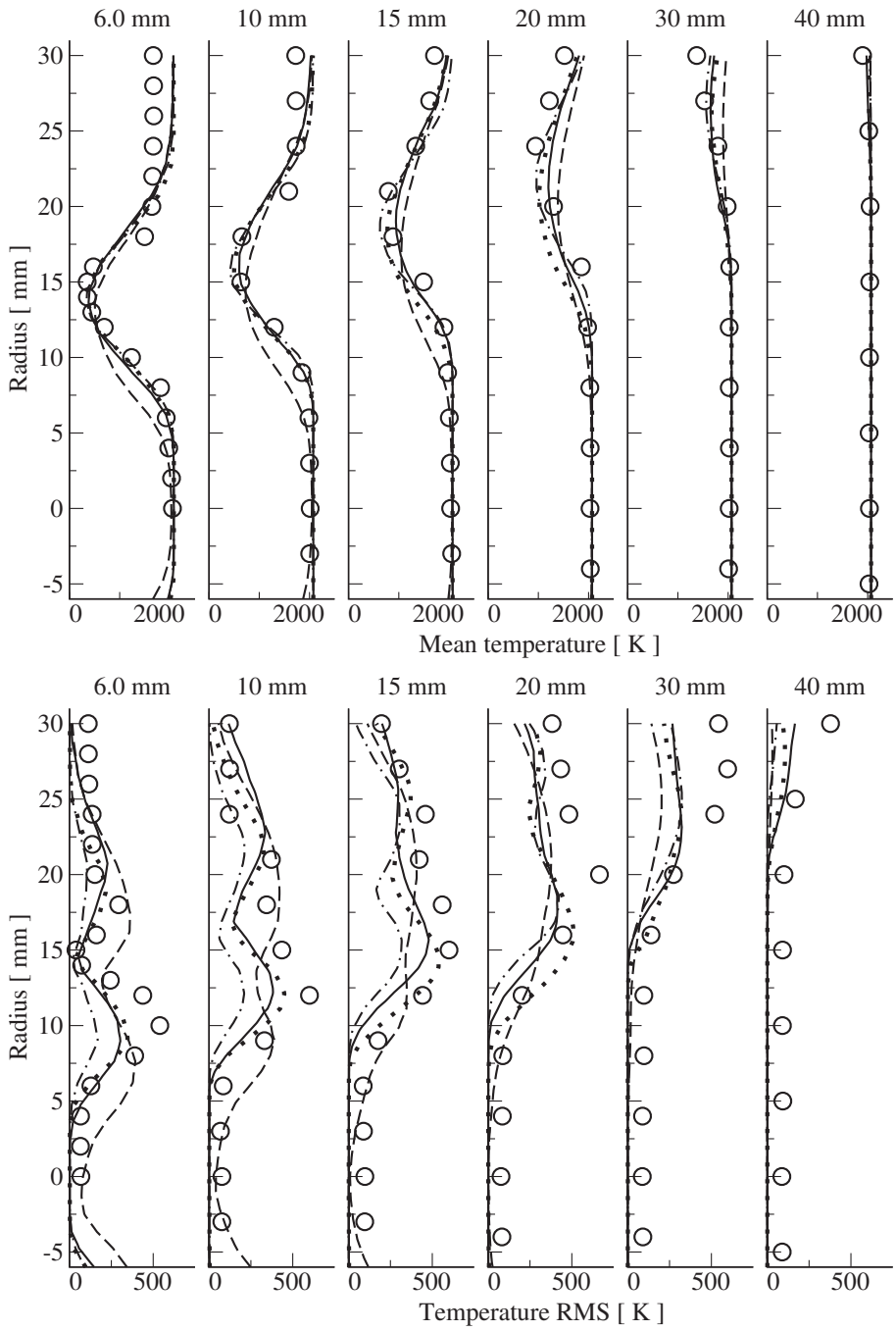


Fig. 2.5 – Mean (a) and resolved RMS (b) temperature profiles along the probe lines. Circles : experimental data. Dot-dashed line : Model A. Dots : Model B. Dashed line : Model C. Line : Model D.

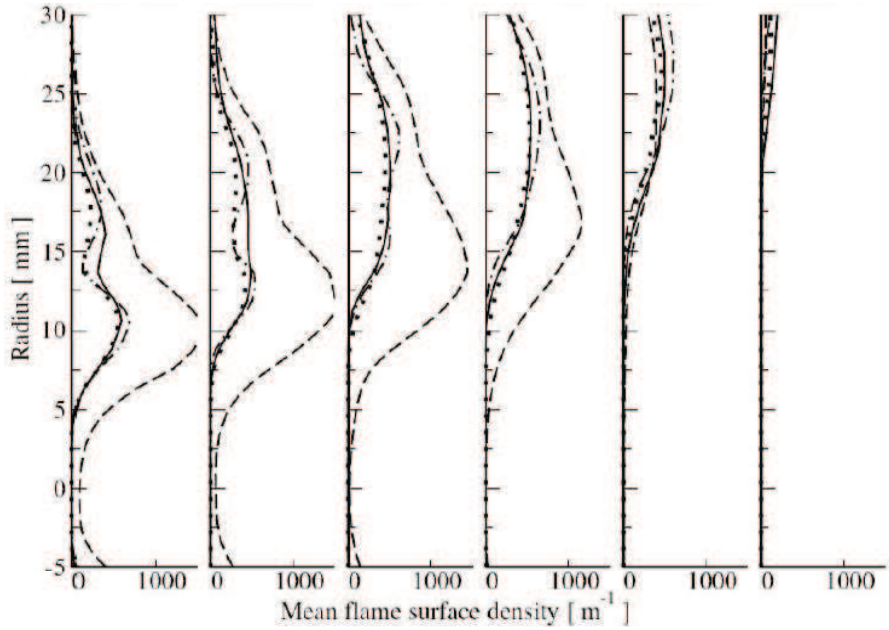


FIG. 2.6 – Profiles of the mean flame surface density $\overline{\Sigma}$ along the probe lines. Dot-dashed line : Model A. Dots : Model B. Dashed line : Model C. Line : Model D.

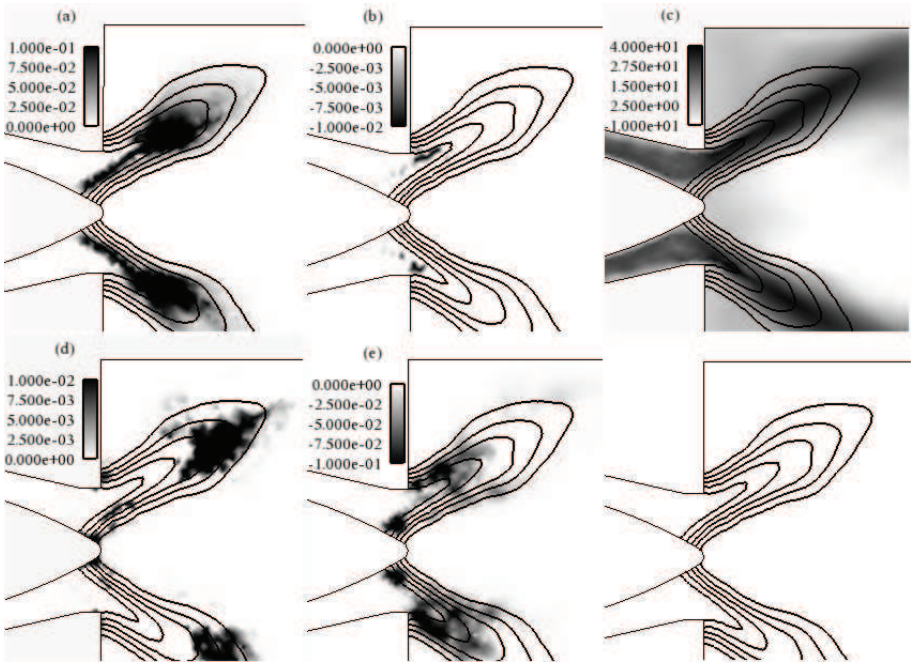


FIG. 2.7 – CGD (resp. GD) contribution in the time-average of the resolved flux (a)(resp. b) and of the closed turbulent flux projected along the normal direction of the flame front (d)(resp. e). Mean axial velocity field (c). Schematic locations of the dominating turbulent transport (f). The thick lines represent iso-lines of mean progress variable regularly spaced between 0.1 and 0.9.

2.8 Conclusion

The modelling of unresolved turbulent transport has been investigated in this work :

- a bibliographical study gave access to previously proposed closures for the unresolved turbulent flux integrating the counter-gradient transport. Convenient formulations of these closures have been proposed to avoid numerical difficulties related to the anti-diffusive nature of the CGD transport. The different closures have then been implemented in the AVBP LES solver.

- *A priori* tests using time-averaged DNS were carried out, exploring effects of thermal expansion rate and turbulent intensity. They revealed that a CGDT closure proportional to the wrinkling factor (Boger *et al.* [10]) led to an overestimation of turbulent fluxes compared with the databases and the Richard *et al.* closure [134, 133] (Table 2.1).

- LES of a swirl burner with several models for the c-transport equation were realized. The following trends were observed :

  - the dynamics of the flame was modified if the counter-gradient effect was taken into account or not. Notably, when neglecting the unresolved CGDT, the flame seems to be to stable (model A) ;

  - an explicit or implicit integration of the Richard closure of the CGDT gave similar results (models B and D). As the implementation of the second model is very straightforward, the implicit approach appears as a convenient way to account for CGDT in practical applications ;

  - closures of the CGDT proportional to the wrinkling predicted a too short and too unstable flame (model C).

  Additional post-processing quantified the time-average of the resolved and sub-grid scale CGDT contributions. This clearly showed the great extend of counter gradient transport, both at the resolved and sub-grid scale levels, demonstrating that unresolved CGDT should not always be neglected in practical applications.

De par ces résultats, il semble logique de retenir la fermeture du transport turbulent proposée par Richard *et al.* pour la suite du travail de thèse. L'expression implicite présentant une robustesse numérique supérieure à la fermeture explicite, la première est conservée dans ce qui suit. Ainsi, l'équation de transport de la quantité $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ sera résolue de façon analogue aux travaux de Richard.

Chapitre 3

Modélisation de la flamme turbulente prémélangée

Le but de ce chapitre est de discuter des formulations actuelles du modèle PCM-FPI pour le prémélange puis d'exploiter les pistes fournies par des ressources bibliographiques pour en tirer deux nouvelles modélisations, couplant l'équation de transport de la densité de surface de flamme et la tabulation de la chimie.
Cette partie est suivie par la premier volet d'un papier soumis à la revue *Combustion and Flame* abordant la modélisation de la flamme turbulente stationnaire par les modèles couplés proposés auparavant et comportant des applications au brûleur PRECCINSTA.

3.1 PCM-FPI pour la modélisation de la flamme de prémélange

Dans le cas particulier de la flamme de prémélange, quelques travaux récents reviennent sur des problèmes théoriques associés au choix d'une pdf de type β pour la variable d'avancement :

- Bray *et al.* [23] ont étudié analytiquement le comportement de la β-pdf lorsque celle-ci prenait une forme bimodale pour mettre en défaut l'estimation qui en était déduite du taux de réaction moyenné par rapport à l'utilisation d'une pdf basée sur les propriétés de la flamme laminaire,

- cette pdf a fait l'objet d'une étude par Jin *et al.* [76] et a été réécrite pour étendre son domaine de définition. Des calculs type DNS d'une flamme prémélangée turbulente ont permis d'extraire une pdf pour la variable d'avancement, ce post-traitement permettant de mettre en défaut le choix de la β-pdf par rapport aux formulations de la pdf basées sur les propriétés de la flamme laminaire.

- Vicquelin *et al.* [160] ont récemment montré que la β-pdf ne permettait pas toujours de reproduire la forme de la pdf en avancement issue de l'opération de filtrage d'un front de flamme laminaire ce qui peut-être préjudiciable pour la dégénerescence du modèle de combustion vers le régime laminaire lors d'un calcul LES.

Afin de compléter ces résultats, nous étudierons dans ce qui suit la modélisation PCM-FPI dédiée à la flamme de prémélange et en dégagerons les points pouvant être améliorés.

Le système d'équations associé à PCM-FPI est le suivant :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y}_c}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_c\right) &= \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(D + D_T\right)\nabla \widetilde{Y}_c\right) + \bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c} && (3.1)\\
\frac{\partial \bar{\rho}Y_{cv}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}Y_{cv}\right) &= \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(D + D_T\right)\nabla Y_{cv}\right) + 2\bar{\rho}(D + D_T)|\nabla \widetilde{Y}_c|^2 \\
&\quad -2\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} + 2\bar{\rho}\left(\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c} - \widetilde{Y}_c\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c}\right) && (3.2)
\end{aligned}$$

L'équation de transport de Y_{cv} permet de déterminer le niveau local de ségrégation en avancement S_c. D'autres scalaires peuvent être exploités à cette fin comme φ_{Y_c} qui s'écrit dans le cas d'une richesse homogène :

$$\varphi_{Y_c} = \varphi_c \widetilde{Y}_c^{eq\ 2} = (1 - S_c)\tilde{c}(1 - \tilde{c})\widetilde{Y}_c^{eq\ 2} = (1 - S_c)\widetilde{Y}_c\left(\widetilde{Y}_c^{eq} - \widetilde{Y}_c\right) \tag{3.3}$$

Pour notre analyse, nous substituerons à l'équation (3.2) l'équation de transport de φ_{Y_c} qui s'écrit plus simplement dans le cas d'une richesse homogène :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{\rho}\varphi_{Y_c}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\varphi_{Y_c}\right) &= \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(D + D_T\right)\nabla \varphi_{Y_c}\right) \\
&+ 2\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} + \bar{\rho}\left(\widetilde{Y}_c^{eq}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c} - 2\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c}\right) && (3.4)
\end{aligned}$$

Afin d'étudier analytiquement la formulation d'un modèle de combustion, la théorie KPP [85] a été exploitée pour des modèles intégrant la densité de surface de flamme, tout d'abord pour des flammes sans expansion thermique [47] puis pour des flammes intégrant cet effet [153]. Cette théorie permet notamment d'extraire des équations de transport des modèles une expression de la vitesse de propagation d'une flamme turbulente stationnaire sous l'hypothèse d'une turbulence dite figée (constante spatialement). Ce concept est malheureusement difficilement extensible au formalisme PCM-FPI.

Les équations monodimensionnelles et stationnaires du système PCM-FPI sont intégrées en espace. Cette opération fournit les expressions suivantes :

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\bar{\rho}\tilde{u}\widetilde{Y}_c}{dx} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx}\left(\bar{\rho}\left(D + D_T\right)\frac{dY_c}{dx}\right)dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c} && (3.5)\\
\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\bar{\rho}\tilde{u}\varphi_{Y_c}}{dx}dx &= \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx}\left(\bar{\rho}\left(D + D_T\right)\frac{d\varphi_{Y_c}}{dx}\right)dx \\
&+ 2\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c}dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\left(\widetilde{Y}_c^{eq}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c} - 2\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c}\right)dx && (3.6)
\end{aligned}$$

La conservation de la masse impose : $\bar{\rho}\tilde{u} = \rho^u S_T$. D'autre part, les flux sont nuls loin du front de flammes ainsi que la quantité φ_{Y_c}. Ces simplifications conduisent au système :

$$\begin{aligned}
\rho^u S_T \widetilde{Y}_c^{eq} &= \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c}dx && (3.7)\\
0 &= 0 \\
&+2\int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c}dx + \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\left(\widetilde{Y}_c^{eq}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c} - 2\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c}\right)dx && (3.8)
\end{aligned}$$

Celui-ci peut être synthétisé par l'équation suivante, explicitant pour rappel la vitesse de flamme stationnaire pour une flamme monodimensionnelle dans une turbulence figée :

$$S_T = \frac{2}{\rho^u \widetilde{Y}_c^{eq\ 2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho} \left(\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c} Y_c} - \widetilde{\chi}_{Y_c} \right) dx \tag{3.9}$$

Ce résultat montre qu'il est très difficile d'anticiper la réponse de PCM-FPI en terme de vitesse de flamme turbulente. En effet, celle-ci est déterminée par l'équilibre entre la dissipation scalaire $\widetilde{\chi}_{Y_c}$ qui doit être fermée et le terme de production $\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c} Y_c}$ qui est fonction de la forme locale de la pdf (donc des niveaux locaux d'avancement filtré $\tilde{c}$ et de ségrégation S_c dans le cas d'une pdf présumée de type β). Une des problématiques liées à cet équilibre entre un terme source et la dissipation scalaire est que cette dernière quantité a fait l'objet de plusieurs travaux offrant ainsi plusieurs possiblités de fermeture, chacune correspondant donc à des vitesses de propagation S_T *a priori* différentes. Les propositions de fermeture de la dissipation scalaire sont listées par la suite.

Dissipation scalaire de l'avancement

Cette fermeture a notamment été traitée par l'adoption d'une équation de transport, établie sous l'approximation d'une densité constante par Mantel et Borghi [94], puis généralisée plus tard par Swaminathan et Bray [145]. D'autres travaux sont associés à des fermetures algébriques :

- la fermeture la plus couramment usitée repose sur une hypothèse d'un retour vers son équilibre de la variance suivant un temps caractéristique de la turbulence. Dans le cadre de la LES, ceci s'écrit [41] :

$$\overline{s}_{\chi_{Y_c}} = \overline{\rho} C_D \frac{Y_{cv}}{\Delta^2 / D_T} \tag{3.10}$$

- récemment, une fermeture qui en est dérivée été proposée par Mura *et al.* [109] puis Domingo *et al.* [42] de sorte à retrouver une fermeture exacte pour une ségrégation de la variable d'avancement proche de l'unité.
  Pour ce faire, l'équation d'évolution de la variable d'avancement est utilisée pour déduire une équation de transport pour la quantité $c(1-c)$:

$$\frac{\partial \rho c(1-c)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} c(1-c)) = \nabla \cdot (\rho D \nabla (c(1-c))) + 2\rho D |\nabla c|^2 - 2\rho c \dot{\omega}_c + \rho \dot{\omega}_c \tag{3.11}$$

  En supposant que la ségrégation en avancement tend vers 1, la quantité $c(1-c)$ tend vers 0 et l'équation (3.11) devient $2\rho D|\nabla c|^2 = 2\rho c \dot{\omega}_c - \rho \dot{\omega}_c$. En écrivant que $c = Y_c / Y_c^{eq}$ dans cette équation et la filtrant, il vient :

$$2\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} = 2\overline{\rho D |\nabla Y_c|^2} = 2\bar{\rho}\widetilde{Y_c \dot{\omega}_{Y_c}} - \bar{\rho}\widetilde{Y_c^{eq} \dot{\omega}_{Y_c}} \tag{3.12}$$

  En décomposant la dissipation scalaire totale $\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c}$ comme la somme d'une contribution résolue (évaluée comme $\bar{\rho} D |\nabla \widetilde{Y}_c|^2$) et d'une contribution sous-maille $\overline{s}_{\chi_{Y_c}}$, cette dernière est exprimée comme :

$$\begin{aligned} \overline{s}_{\chi_{Y_c}} &= \bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} - \bar{\rho} D |\nabla \widetilde{Y}_c|^2 \\ &= -\bar{\rho} D |\nabla \widetilde{Y}_c|^2 + \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c} Y_c} - \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c} Y_c^{eq}}/2 \end{aligned} \tag{3.13}$$

Le lien est finalement fait entre la fermeture classique pour la dissipation scalaire et la fermeture de l'équation (3.13) à travers une pondération par le facteur de ségrégation :

$$\overline{s}_{\chi_{Y_c}} = (1 - S_c)\bar{\rho} C_D (D_T/\Delta^2) Y_{cv} + S_c(-\bar{\rho} D |\nabla \tilde{Y}_c|^2 + \overline{\rho \dot{\omega}_{Y_c} Y_c} - \overline{\rho \dot{\omega}_{Y_c} Y_c^{eq}}/2) \tag{3.14}$$

– une autre fermeture a également été proposée [156] pour la modélisation de flammes pour lesquelles de hauts niveaux de ségrégation en avancement sont rencontrés. Cette modélisation peut être retrouvée en exploitant l'équation (3.12) et une fermeture du taux de réaction par une modélisation basée sur la densité de surface de flamme $\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c = \rho^u S_L \overline{\Sigma}$ (où $\overline{\Sigma} = \Xi |\nabla \bar{c}|$) :

$$\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} = \frac{1}{2}(2c_m - 1)\rho^u S_L \Xi |\nabla \bar{c}| \widetilde{Y}_c^{eq\ 2} S_c \tag{3.15}$$

Le facteur S_c a été ajouté pour assurer la réalisabilité du modèle. La fermeture donnée par l'équation (3.15) a par la suite été exploitée lors de l'utilisation de PCM-FPI [55] pour le calcul d'une flamme prémélangée turbulente.

– d'autres modèles qui sont issus de la réduction de l'équation de transport de la dissipation scalaire pour des flammes à fort nombre de Damköhler sont également disponibles. Le travail le plus récent est du à Kolla *et al.* [83] dans lequel la dissipation scalaire est close dans un contexte de modélisation RANS sous la forme :

$$\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} = \frac{1}{\beta'}\left(2K_c^* \frac{S_l}{\delta_l} + (C_3 - \tau C_4 Da_L)\frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}\right)\widetilde{c''^2} \tag{3.16}$$

où $\tilde{\epsilon}$ et $\tilde{k}$ sont respectivement les moyennes de la dissipation et de l'énergie cinétique turbulentes, K_c^*, C_3, C_4 et β' sont des constantes du modèle et Da_L est un nombre de Damköhler local.

Notons que le choix de la dissipation scalaire intégrant la notion de densité de surface de flamme (Eq. 3.15), lorsque S_c tend vers 1, permet de contrôler la vitesse de flamme turbulente. En effet, si $S_c = 1$, on peut écrire suivant Veynante *et al.* [159] :

$$\bar{\rho}\widetilde{c\dot{\omega}_c} = c_m \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c \tag{3.17}$$

Ceci peut se réécrire dans le cas d'une richesse homogène : $\bar{\rho}\widetilde{Y_c \dot{\omega}_{Y_c}} = c_m \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}\widetilde{Y}_c^{eq\ 2}$. En combinant cette expression aux équations (3.9) et (3.15) la vitesse de propagation S_T devient :

$$S_T = \frac{2}{\rho^u \widetilde{Y}_c^{eq\ 2}} \int_{-\infty}^{+\infty} c_m \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}\widetilde{Y}_c^{eq} - \frac{1}{2}(2c_m - 1)\rho^u S_L \Xi |\nabla \bar{c}| \widetilde{Y}_c^{eq\ 2} dx \tag{3.18}$$

$$S_T = 2c_m S_T + (1 - 2c_m) S_L \int_{-\infty}^{+\infty} \Xi |\nabla \bar{c}| dx \tag{3.19}$$

$$S_T = S_L \int_{-\infty}^{+\infty} \Xi |\nabla \bar{c}| dx \tag{3.20}$$

En faisant l'hypothèse que la turbulence soit figée, l'impact de cette dernière sur le front de flamme en terme de plissement est constante à travers son épaisseur. La vitesse S_T est finalement exprimée comme :

$$S_T = \Xi S_L \tag{3.21}$$

Ainsi la vitesse de flamme turbulente est-elle directement imposée par la fermeture du plissement Ξ qui intervient dans l'expression de la dissipation scalaire. Ce cas particulier apparaît comme le seul pour lequel la valeur de la vitesse turbulente est connue *a priori* mais en pratique on ne peut pas garantir que $S_c \to 1$ avec l'équation de transport de Y_{cv}. La partie suivante présente des modélisations basées sur les approches PCM-FPI et le concept de densité de surface de flamme pour simultanément :

- bénéficier de l'intégration des effets de chimie complexe offerte par PCM-FPI ;
- contrôler S_T par une modélisation de la densité de surface de flamme ;
- contrôler l'épaisseur de la flamme résolue et garantir une résolution correcte du front mais pas excessive pour bien décrire l'interaction de la flamme avec les tourbillons résolus.

3.2 Modélisations alternatives basées sur des pdf présumées bimodales

Afin de surmonter les inconvénients liés à l'emploi d'une β-pdf, nous considérons une pdf bimodale ainsi que proposée par Bray *et al.* [22] :

$$\tilde{P}(c^*; \underline{x}, t) = \alpha(\underline{x}, t)\delta(c^*) + F(c^*; \underline{x}, t) + \beta(\underline{x}, t)\delta(1 - c^*) \tag{3.22}$$

avec la fonction F représentant la pdf en avancement pour les iso-surfaces c^* internes au front de flamme.

Ainsi que montré dans le travail de Vervisch *et al.* [154], il est possible de relier la densité de surface de flamme $\Sigma(c^*; x, t)$ à la pdf de la variable d'avancement au travers de la formulation suivante :

$$\bar{P}(c^*; \underline{x}, t) = \frac{\Sigma(c^*; \underline{x}, t)}{\overline{|\nabla c||c^*}} \tag{3.23}$$

Cette définition est exploitée pour la fermeture de la partie interne de la pdf détaillée dans l'équation Eq. (3.22) *via* la relation existant entre la pdf type Favre et la pdf type Reynolds $\tilde{P}(c^*; \underline{x}, t) = \rho(c^*)/\bar{\rho}(\underline{x}, t)\bar{P}(c^*; \underline{x}, t)$. L'hypothèse d'un front de flamme infiniment fin permet d'écrire que les iso-surfaces c^* restent très proches les unes des autres dans le front de flamme. Ceci se traduit par l'approximation suivante : $\overline{|\nabla c||c^*} \approx \overline{|\nabla c^*|}$. A partir de ces considérations, la pdf s'écrit :

$$\tilde{P}(c^*; \underline{x}, t) = \alpha(\underline{x}, t)\delta(c^*) + \frac{\rho(c^*)}{\bar{\rho}(\underline{x}, t)} \frac{\Sigma(c^*; \underline{x}, t)}{\overline{|\nabla c^*|}} + \beta(\underline{x}, t)\delta(1 - c^*) \tag{3.24}$$

Concernant la quantité $\Sigma(c^*; \underline{x}, t)$, deux choix de modélisation peuvent être adoptés. Ceux-ci sont détaillés dans ce qui suit.

3.2.1 Fermeture algébrique

Lors de son développement de la σ-pdf, Domingo *et al.* [41] ont supposé que $\Sigma(c^*;\underline{x},t)$ variait faiblement dans le front de flamme, ce qui se traduisait par $\Sigma(c^*;\underline{x},t) \approx \sigma(\underline{x},t)$. La partie interne de la pdf, $F(c^*;\underline{x},t)$, peut alors s'expliciter comme étant :

$$F(c^*;\underline{x},t) = \frac{\rho(c^*)}{\bar{\rho}(\underline{x},t)}\frac{\sigma(\underline{x},t)}{\overline{|\nabla c^*|}}H(c^*)H(1-c^*) \tag{3.25}$$

où H est la fonction de Heavyside, de façon à restreindre cette contribution au front de flamme.

Les termes sources des espèces chimiques sont fermés à l'aide de la pdf comme :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) = \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(c^*)\tilde{P}(c^*;\underline{x},t)dc^* \tag{3.26}$$

En explicitant la pdf dans cette équation, il vient :

$$\begin{aligned}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) &= \int_{0^+}^{1^-} \dot{\omega}_{Y_i}(c^*)\frac{\rho(c^*)}{\bar{\rho}(\underline{x},t)}\frac{\sigma(x,t)}{\overline{|\nabla c^*|}}dc^* = \frac{\sigma(\underline{x},t)}{\bar{\rho}(\underline{x},t)}\int_{0^+}^{1^-}\frac{\rho(c^*)\dot{\omega}_{Y_i}(c^*)}{|\nabla c^*|}dc^* \\ &= \frac{\sigma(\underline{x},t)}{\bar{\rho}(\underline{x},t)}\int_{-\infty}^{+\infty}\rho(x^*)\dot{\omega}_{Y_i}(x^*)dx^* \end{aligned} \tag{3.27}$$

Or, si l'on prend en compte l'équation de la flamme prototype 1D stationnaire laminaire [159] :

$$\rho_u S_L \frac{dY_i}{dx} = \frac{d}{dx}\left(\rho D\frac{dY_i}{dx}\right) + \rho\dot{\omega}_{Y_i} \tag{3.28}$$

que l'on intègre entre $x = -\infty$ et $x = +\infty$, nous obtenons :

$$\rho^u S_L \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dY_i}{dx}dx = 0 + \int_{-\infty}^{+\infty}\rho\dot{\omega}_{Y_i}dx \tag{3.29}$$

d'où :

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\rho\dot{\omega}_{Y_i}dx = \rho^u S_L(Y_i(c=1) - Y_i(c=0)) \tag{3.30}$$

et l'écriture complète :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) = \rho^u S_L\sigma(\underline{x},t)(Y_i(c=1) - Y_i(c=0)) \tag{3.31}$$

Cette fermeture du taux de réaction des espèces chimiques est similaire à un taux de réaction de type flammelette du fait du produit entre un taux de consommation local ($\rho^u S_L$) et une variable représentant une densité de surface de flamme (σ). Afin d'expliciter σ, les propriétés de la pdf : $\int_0^1 c^*\tilde{P}(c^*)dc^* = \tilde{c}$ et $\int_0^1 c^{*2}\tilde{P}(c^*)dc^* = \widetilde{c^2}$ sont couplées à l'expression fournie par l'équation (3.24) ; il vient :

$$\beta + \frac{\sigma(\underline{x},t)}{\bar{\rho}(\underline{x},t)}\int_0^1\frac{c^*\rho(c^*)}{\overline{|\nabla c^*|}}dc^* = \tilde{c} \tag{3.32}$$

$$\beta + \frac{\sigma(\underline{x},t)}{\bar{\rho}(\underline{x},t)}\int_0^1\frac{c^{*2}\rho(c^*)}{\overline{|\nabla c^*|}}dc^* = \widetilde{c^2} \tag{3.33}$$

Par différence des deux équations, le paramètre σ s'écrit :

$$\sigma(\underline{x},t) = \frac{\bar{\rho}(\underline{x},t)(1-S_c)\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\int_0^1 \frac{\rho(c^*)c^*(1-c^*)}{|\nabla c^*|}dc^*} \tag{3.34}$$

Ce résultat est bien sûr identique à ce qui est obtenu dans le papier de Bray *et al.* [23] lorsque celui-ci lie le taux de réaction obtenu à partir de la pdf qu'il propose et un taux de réaction déduit d'une densité de surface de flamme pour fermer ce scalaire.
La ségrégation en avancement peut être déterminée par l'équation de transport d'une quantité contenant une information sur la variance de $\widetilde{Y_c}$. Le scalaire φ_{Y_c} est intéressant du fait de la propriété suivante dans le cas du prémélange parfait :

$$\varphi_{Y_c} = \varphi_c \widetilde{Y}_c^{eq\ 2} = (1-S_c)\,\tilde{c}\,(1-\tilde{c})\,\widetilde{Y}_c^{eq\ 2} \tag{3.35}$$

De ce fait, σ est proportionnel à φ_{Y_c}, ce lien s'écrit :

$$\sigma = \frac{\bar{\rho}(\underline{x},t)\varphi_{Y_c}}{\widetilde{Y}_c^{eq\ 2}\int_0^1 \frac{\rho(c^*)c^*(1-c^*)}{|\nabla c^*|}dc^*} \tag{3.36}$$

L'équation de transport (3.4) peut alors être reprise, de façon analogue à la démarche de Domingo *et al.* [41]. En se plaçant dans la situation de fortes valeurs atteintes par le nombre de Damköhler, la dissipation scalaire totale $\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c}$ est fermée en utilisant la fermeture fournie dans l'équation (3.15). D'autre part, cette hypothèse permet également d'écrire : $\bar{\rho}\widetilde{Y_c\dot{\omega}}_{Y_c} = c_m\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}\widetilde{Y}_c^{eq}$. Les termes de dissipation scalaire en avancement et de production étant fermés, l'équation (3.4) devient ici :

$$\begin{aligned}\frac{\partial\bar{\rho}\varphi_{Y_c}}{\partial t} + \nabla.\left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\varphi_{Y_c}\right) &= \nabla\cdot\left(\bar{\rho}\left(D+D_T\right)\nabla\varphi_{Y_c}\right)\\ &\quad +(2c_m-1)\rho^u S_L\widetilde{Y}_c^{eq\ 2}(\overline{\Sigma}-\sigma)\end{aligned} \tag{3.37}$$

Cette écriture met en évidence le terme source $\widetilde{\dot{\Omega}}_{\varphi_{Y_c}}$ où :

$$\widetilde{\dot{\Omega}}_{\varphi_{Y_c}} = (2c_m-1)\rho^u S_L\widetilde{Y}_c^{eq\ 2}\left(\overline{\Sigma}-\sigma\right) \tag{3.38}$$

Le paramètre σ étant explicité, le terme $\widetilde{\dot{\Omega}}_{\varphi_{Y_c}}$ peut se réécrire :

$$\widetilde{\dot{\Omega}}_{\varphi_{Y_c}} = (2c_m-1)\rho^u S_L\widetilde{Y}_c^{eq\ 2}\left(\overline{\Sigma}-\frac{\bar{\rho}\varphi_{Y_c}}{\delta^*}\right) \tag{3.39}$$

où $\delta^* = \int_{0^+}^{1^-}\frac{\rho(c^*)c^*(1-c^*)}{|\nabla c^*|}dc^*$.

Cette équation est complètement fermée si la densité de surface de flamme $\overline{\Sigma}$ est exprimée. Dans ce cas, connaissant φ_{Y_c}, σ et le facteur de ségrégation S_c peuvent être obtenus.
En utilisant cette expression dans l'équation (3.4), et en divisant tous les termes de l'équation obtenue par le produit $\delta^*\widetilde{Y}_c^{eq\ 2}$, il vient :

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} + \nabla\cdot(\tilde{\mathbf{u}}\sigma) = \nabla\cdot\left(\left(D+D_T\right)\nabla\sigma\right) + \frac{\overline{\Sigma}-\sigma}{\tau^*} \tag{3.40}$$

où $\tau^* = \delta^*/((2c_m - 1)\rho^u S_L)$. Cette équation n'est pas résolue mais elle permet d'illustrer la mécanique associée à la modélisation choisie : la quantité σ tend vers la densité de surface de flamme imposée localement $\overline{\Sigma}$ suivant un temps caractéristique τ^*. $\widetilde{\dot{\Omega}}_{\varphi_{Y_c}}$ peut donc constituer une fermeture alternative intéressante pour le terme source de l'équation de transport de φ_{Y_c} quand S_c tend vers 1. En effet, comme montré préalablement, si S_c tend vers 1 et si la dissipation scalaire est fermée suivant (Eq. (3.15)) alors le plissement Ξ imposé pour fermer la densité de surface de flamme $\overline{\Sigma}$ impose la vitesse de propagation turbulente S_T. Cette propriété suggère donc de réutiliser l'équation de transport du modèle ECFM-LES pour la prédiction de $\overline{\Sigma}$, celle-ci ayant déjà prouvé son potentiel pour la réalisation de calculs moteurs.
Théoriquement, il serait possible d'étendre cette fermeture de la somme du terme source et de la dissipation scalaire de sous-maille (Eq. (3.39)) à toutes les valeurs prises par la ségrégation en avancement. Ceci peut se faire de façon analogue aux travaux de Domingo *et al.* [42] et Mura *et al.* [109] pour la fermeture de la dissipation scalaire :

$$\begin{aligned}\widetilde{\dot{\Omega}}_{\varphi_{Y_c}} &= S_c(2c_m - 1)\rho^u S_l \widetilde{Y}_c^{eq\ 2}\left(\overline{\Sigma} - \frac{\bar{\rho}\varphi_{Y_c}}{\delta^*}\right) \\ &\quad +(1 - S_c)\left(2\bar{\rho}D|\nabla\widetilde{Y}_c|^2 + 2\overline{\rho}C_D\frac{Y_{cv}}{\Delta^2/D_T} + \bar{\rho}\left(\widetilde{Y}_c^{eq}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c} - 2\widetilde{Y_c\dot{\omega}_{Y_c}}\right)\right) \quad (3.41)\end{aligned}$$

où les quantités $\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c}$ et $\widetilde{Y_c\dot{\omega}_{Y_c}}$ sont les taux de réaction laminaires moyennés par la β-pdf et interpolés dans la table en fonction des valeurs locales de $\tilde{c}$ et S_c.
D'autre part, de sorte à assurer la cohérence d'ensemble du modèle par rapport à cette extension, les taux de réaction des espèces chimiques s'écriraient :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x}, t) = S_c\rho^u S_L\sigma(\underline{x}, t)(Y_i(c = 1) - Y_i(c = 0)) + (1 - S_c)\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{\beta-pdf} \quad (3.42)$$

où $\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{\beta-pdf}$ est un taux de réaction filtré déduit d'une β-pdf, comme cela est fait classiquement dans le modèle PCM-FPI.
Bien que le modèle obtenu ne souffre *a priori* d'aucun problème théorique dans sa formulation, quelques inconvénients d'ordre pratique doivent être soulignés.
Tout d'abord, dans le cas de la modélisation d'une flamme de prémélange, il est difficile d'envisager que les fermetures adoptées pour l'équation de transport de φ_{Y_c} assurent que la ségrégation en avancement tende vers 1. De ce fait, ce n'est plus seulement la densité de surface de flamme $\overline{\Sigma}$ qui pilote la vitesse de propagation de la flamme et cette dernière ne peut donc plus être contrôlée.
De plus, même dans le cas où $S_c = 1$, le couplage peut présenter une certaine fragilité d'un point de vue numérique puisque par construction la densité de surface de flamme reconstruite σ tend vers la densité de surface de flamme imposée $\overline{\Sigma}$ suivant un temps de relaxation τ^*. Bien qu'aucun problème n'ait été observé sur des cas tests de propagations de flammes monodimensionnelles dans des zones de richesse homogène, le profil de la densité de surface de flamme σ ne tendait plus vers le profil de $\overline{\Sigma}$ lorsque la flamme traversait un gradient de richesse.
En conséquence, une autre possibilité de couplage plus simple est envisagée en partant de l'écriture fournie dans l'équation (3.24) ainsi qu'expliqué dans la partie suivante.

3.2.2 Fermeture dynamique

En conservant l'hypothèse que l'épaisseur de flamme est infiniment mince, il est possible d'écrire dans l'équation (3.24) que $\Sigma(c^*;\underline{x},t) \approx \overline{\Sigma}(\underline{x},t)$ où $\overline{\Sigma}(\underline{x},t)$ est la densité de surface de flamme généralisée provenant d'une fermeture algébrique ou d'une équation de transport. Dans ce cas, de manière analogue à précédemment, le taux de réaction est clos comme :

$$\begin{aligned}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) &= \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(c^*)\tilde{P}(c^*;\underline{x},t)dc^* = \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(c^*)\frac{\rho(c^*)}{\bar{\rho}(\underline{x},t)}\frac{\overline{\Sigma}(\underline{x},t)}{\overline{|\nabla c^*|}}dc^* \\ &= \frac{\rho^u}{\bar{\rho}}S_L\overline{\Sigma}(\underline{x},t)\left(Y_i(c=1)-Y_i(c=0)\right) \end{aligned} \tag{3.43}$$

Finalement, partant d'une pdf proche de celle de Domingo et Bray (la différence se faisant sur l'évaluation de la densité de surface de flamme), le lien est fait très facilement avec les modélisations type Modèle de Flamme Cohérente basée sur le transport de la densité de surface de flamme. Notons que ce résultat a été exploité récemment dans les travaux de thèse de Ghedhaifi [60]. Néanmoins, en toute rigueur, si l'on écrit les relations de l'équation (1.37) pour cette pdf, les coefficients α et β de l'équation (3.24) deviennent :

$$\alpha = (1-\tilde{c}) - \frac{\overline{\Sigma}}{\bar{\rho}}\int_{0^+}^{1^-}\frac{\rho(c^*)(1-c^*)dc^*}{|\nabla c^*|} \tag{3.44}$$

$$\beta = \tilde{c} - \frac{\overline{\Sigma}}{\bar{\rho}}\int_{0^+}^{1^-}\frac{\rho(c^*)c^*dc^*}{|\nabla c^*|} \tag{3.45}$$

L'expression de la pdf de l'équation (3.43) permet notamment de lier les expressions de $\tilde{c}$ et $\bar{c}$ qui interviennent dans certains termes de l'équation de transport de la densité de surface de flamme. Afin de ne pas perturber le fonctionnement de cette dernière, la pdf donnée par la théorie BML est ici conservée comme cela est fait usuellement pour les modèles à densité de surface de flamme [66, 134] c'est-à-dire que la pdf est simplifiée comme :

$$\widetilde{P}(c^*;\underline{x},t) = (1-\tilde{c}(\underline{x},t))\delta(c^*) + \tilde{c}(\underline{x},t)\delta(1-c^*) \tag{3.46}$$

3.3 Formulations de nouveaux modèles pour le prémélange

Dans cette partie, l'intégration des résultats présentés auparavant pour l'élaboration de modèles couplant les formalismes ECFM-LES et PCM-FPI est détaillée.

3.3.1 Couplage fort (modèle PCM-CFM I)

Un premier modèle est obtenu simplement en reprenant le formalisme de l'équation (3.43). La limitation de cette modélisation est *a priori* une prédiction approximée des états intermédiaires des espèces au sein du front de flamme, du fait qu'une variation monotone est imposée, ce qui est faux pour des espèces minoritaires comme CO ou OH.

La composition d'équilibre cible Y_i^{eq} est interpolée dans une table à partir de calculs PREMIX de flammes laminaires stationnaires monodimensionnelles ou de calculs SENKIN de réacteurs homogènes à pression constante.
La variable $\overline{\Sigma}$ peut être fermée algébriquement ou être déterminée à partir d'une équation de transport. Le système complet d'équations est écrit par la suite.

3.3.2 Couplage faible (modèle PCM-CFM II)

Un autre formalisme est ici proposé afin d'apporter une correction à la vitesse prédite par PCM-FPI.
Des inconvénients sont liés à l'emploi de la β-pdf ainsi que détaillé en début de chapitre. Néanmoins, il a déjà permis, dans un cadre LES, une modélisation d'une flamme prémélangée turbulente satisfaisante par rapport aux résultats fournis par l'expérience [59].

Le niveau de vitesse de propagation du front turbulent étant difficilement anticipé *a priori*, il apparaît possible de le contrôler en remplaçant le taux de réaction déterminé à partir de la β-pdf par un taux de réaction fourni par une autre modélisation spécifique à la combustion prémélangée. Sachant que la cible des modèles conçus est le calcul moteur et que ECFM-LES a déjà fourni des résultats intéressants dans cette optique, le choix du modèle ECFM-LES s'avère ici judicieux. Le couplage entre ECFM-LES et PCM-FPI consiste donc dans le principe à reprendre le système d'équations de PCM-FPI ainsi que la table chimique pré-traitée à l'aide des pdf présumées β en tenant compte des modifications suivantes :

- le taux de réaction de la variable d'avancement non normalisée $\widetilde{Y}_c$ devient :
$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c} = \rho^u S_L \overline{\Sigma} \widetilde{Y}_c^{eq} \tag{3.47}$$
- étant donné que l'on suppose que le niveau de ségrégation local est suffisamment élevé pour fermer le taux de réaction par une hypothèse de flammelette, le lien établi précédemment (Eq. (3.34)) entre la ségrégation S_c et la densité de surface de flamme est conservé :
$$S_c = 1 - \frac{\overline{\Sigma}\delta^*}{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})} \tag{3.48}$$

Cette modélisation *ad hoc* permet d'utiliser PCM-FPI en contrôlant la vitesse de propagation du front turbulent et de bénéficier à travers la tabulation des effets de chimie complexe.
Plus de détails sur cette méthodologie sont fournis dans la partie suivante.

3.4 Proposition et étude de nouveaux formalismes

Ce qui suit correspond à un article soumis à la revue *Combustion and Flame* et aborde la modélisation de la flamme prémélangée turbulente stationnaire. Il contient des tests de principe de la modélisation PCM-FPI, le détail du couplage entre la chimie tabulée et l'équation de transport de la densité de surface de flamme pour l'élaboration des deux modèles évoqués préalablement et des tests de validation sur une flamme de laboratoire stabilisée par *swirl*.

3.5 Introduction

In the past few years, the development of massively parallel computers contributed to drastic CPU cost reductions in computational fluid dynamics making possible Large-Eddy Simulation (LES) of real combustion systems, such as gas turbines [140, 104, 13, 15] or piston engines [49, 148, 134, 2, 153]. LES that was previously limited to laboratory-flame oversimplified geometries, nowadays appears as a useful tool for the design of new combustion chambers, specifically in the field of premixed turbulent combustion, where it has already been used for understanding flame and flow unsteadiness [103, 51, 13, 153]. Overall, using massively parallel computers, more grid points are introduced in the simulation. However, because of the increase in flow complexity and domain size considered, the mesh-resolution is still coarse compared to thin flame reaction zones and accurate modeling of unresolved flame fronts is required to get reliable numerical results. In premixed turbulent combustion, the flame burning rate is directly linked to the turbulent flame surface [21]. Most industrial systems operate at a high Reynolds number, the flame surface is highly distorted and the flame wrinkling cannot be entirely resolved by LES meshes. The sub-grid scale (SGS) modeled expression of the space-filtered burning rate should, at least, preserve two basic properties of turbulent premixed flames [45], namely their propagation velocity, which was related in the literature to a measure of SGS velocity fluctuations u' and to the characteristic size of the SGS turbulent eddies [31, 32, 127], and their thickness. Concerning flame length scales, keeping the flame brush thickness under control in Large-Eddy Simulations is not an obvious task, because of the non-linear interactions between the resolved flame front and the resolved and unresolved eddies. The need for predicting realistic turbulent flame speeds motivated first developments of SGS closures based on the Coherent Flame Model (CFM) [65, 66], complemented by ECFM-LES [134, 153] that notably allows for monitoring the flame brush thickness. The CFM formalism consists in solving the balance equation for the filtered flame surface density $\overline{\Sigma}$. One major drawback of this approach is that all chemical information is packed into a single quantity : the laminar flame speed ; on the other hand, one interesting feature of ECFM-LES is that a flame length scale information is embedded in $\overline{\Sigma}$. Another option for LES of combustion is the use of tabulated chemistry generated from one-dimensional laminar flame archetypes, called flamelets, which are then filtered with presumed probability density functions (pdf) representative of the SGS statistical values of the flamelet control parameters ; both diffusion and premixed flamelets have been combined with presumed pdfs in a LES context [127, 42, 59, 161, 58, 144]. Both concepts, CFM and flamelets with presumed pdfs approaches, were first introduced in Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) calculations [20, 47]. The second model was mostly coupled with β-shape pdfs, a presumed shape that was subsequently not found optimal for premixed flames [41, 23, 76]. Moreover, there is no ingredient in flamelet tabulated chemistry (FPI [62] or FGM [152]) combined with presumed pdfs (PCM-FPI [156]), to control directly turbulent flame speed and flame brush thickness, mainly because the probability density function is defined in one-point and no length scale information is available.

The objective of this paper is to propose hybrid approaches combining presumed pdfs with flame surface density (FSD) SGS closures. The role of the flamelet with presumed pdfs is to supplement the lack of detailed chemistry in flame surface density models, while the flame surface introduces a length scale, useful for keeping flame speed and thickness under control. The models developed in this work are implemented in the AVBP sol-

ver [13] and used to perform LES of a turbulent premixed burner experimentally studied by Meier *et al.* [97]. Species and temperature profiles from the simulations are then compared with measurements. Finally, differences between LES results obtained with the hybrid SGS closures and those from a previous study, using the PCM-FPI approach (Galpin *et al.* [59]), are analysed. For this purpose, *a posteriori* comparisons based on statistically one-dimensional flames are performed to better determine the limits of presumed pdf based models in the premixed combustion framework.

3.6 Hybrid approaches for LES of turbulent premixed flames combining complex chemistry and flame surface density concept

The aim of most LES combustion model is to provide closures for unclosed terms of the filtered species (or progress variable) transport equations :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y_i}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y_i}\right) = -\nabla \cdot \left(\overline{\rho \mathbf{u} Y_i} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y_i}\right) + \underbrace{\nabla \cdot \left(\overline{\rho D_i \nabla Y_i}\right) + \bar{\rho}\tilde{\dot{\Omega}}_{Y_i}}_{\bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_i}} \tag{3.49}$$

where ρ is the density, Y_i is the mass fraction of the ith specie and $\mathbf{u}$ is the velocity vector. The three RHS terms need to be modeled and respectively represent the unresolved convective transport and molecular diffusion plus the filtered chemical source ; the last two terms are combined in a single one $\bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_i}$. Reynolds spatial filtering operator is denoted '$\bar{a}$' and $\widetilde{a} = \overline{\rho a}/\bar{\rho}$ is the Favre mass weighted one.
In this section, presumed pdf and FSD based closures from the literature are first briefly reviewed. Coupling of these approaches is then discussed, leading to the proposition of two hybrid models including complex chemistry effects and accurate prediction of the turbulent flame speed.

3.6.1 LES models based on flame surface density

The unclosed filtered progress variable $\tilde{c}$ transport equation reads, for a model based on the flame surface density concept :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{c}) + \nabla \cdot (\overline{\rho \mathbf{u} c} - \bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{c}) = \rho^u S_L \overline{\Sigma} \tag{3.50}$$

where ρ^u denotes the fresh gases density, S_L is the laminar flame speed, $\overline{\Sigma}$ is the Reynolds filtered FSD and $\tilde{c}$ evolves from 0 in the fresh gases to unity in the burned gases.
The flame surface density has previously been closed following two approaches in a LES context :

- by using algebraic closures [12, 166, 50] : $\overline{\Sigma} = \Xi^{eq} \left|\nabla \bar{c}\right|$, where the wrinkling factor Ξ^{eq} can be computed analytically. Such models assume an equilibrium between flame surface production by turbulence and destruction by curvature effects leading to SGS wrinkling values constant in space and time in frozen or homogeneous and isotropic

turbulence [134, 135] ;

– by solving a transport equation for the flame surface density [134, 66].

The first type of closure is not well suited for modeling highly unsteady phenomena [134], nevertheless it can be retained for quasi-steady turbulent flames. The latter takes into account the impact of the strain rate and the curvature of the flame front and integrates the wrinkling history effects whose importance has been highlighted by Driscoll [45]. Both approaches can be *a priori* coupled to presumed pdf and are then compared in this work.

Algebraic closure for the FSD

Following algebraic approaches from the literature [11, 10] the filtered $\widetilde{c}$ equation is expressed as :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{c}) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\frac{D_{tot}}{Sc_T}\nabla\widetilde{c} \right) + \rho^u S_L \Xi^{eq} \frac{\widetilde{c}(1-\widetilde{c})}{\widehat{\Delta}} \tag{3.51}$$

where Sc_T is the turbulent Schmidt number, D_{tot} is the total diffusivity and $\widehat{\Delta}$ is the combustion filter size equal to a couple of times the mesh size [134]. The source term of this equation is not based on the Reynolds filtered progress variable, but on the Favre quantity in order to include part of the effects of non-gradient transport encountered in premixed flames. Considering Boger's expression [10] for the total diffusivity : $D_{tot} \propto S_L \Xi^{eq} \widehat{\Delta}$, the formulation of Eq. (3.51) is similar to the thickened flame model (TFLES) [36], the thickening factor of TFLES being here replaced by the combustion filter size. This property ensures the flame brush thickness control at a value close to $\widehat{\Delta}$ [10, 133].

Transport equation for the flame surface density : the ECFM-LES model

The unclosed filtered flame surface density transport equation was first proposed by Veynante and Poinsot [157] in a LES context. Then Hawkes and Cant [65, 66] and Richard *et al.* [134, 135] proposed closures for the source terms of this equation. Richard also included non-gradient transport effects in both filtered progress variable and flame surface density transport equations and worked on the flame brush thickness control leading to the ECFM-LES model [153] :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{c}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{c}) = \nabla \cdot \left(\frac{\bar{\rho}\widehat{\nu_T}}{Sc_T}\nabla\tilde{c} \right) + \rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}} \tag{3.52}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}}{\partial t} + \nabla.(\tilde{\mathbf{u}}\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}) \;=\; & \underbrace{\nabla \cdot \left(\frac{\widehat{\nu_T}}{Sc_T}\sigma_c \nabla\overline{\Sigma}_{\tilde{c}} \right)}_{\text{(I)}} + \underbrace{(\nabla \cdot \hat{\tilde{\mathbf{u}}} - \bar{\mathbf{n}}\,\bar{\mathbf{n}} : \nabla\hat{\tilde{\mathbf{u}}})\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}}_{\text{(II)}} + \underbrace{\frac{\Gamma}{\sigma_c}\frac{u'_{\hat{\Delta}}}{\hat{\Delta}}\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}}_{\text{(III)}} \\
& + \underbrace{S_D(\nabla \cdot \bar{\mathbf{n}})\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}}_{\text{(IV)}} - \underbrace{\nabla.(S_D\bar{\mathbf{n}}\overline{\Sigma}_{\tilde{c}})}_{\text{(V)}} \\
& + \underbrace{\beta_c S_L \frac{c^* - \bar{c}}{\bar{c}(1-\bar{c})}(\overline{\Sigma}_{\tilde{c}} - \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}^{lam})\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}}_{\text{(VI)}}
\end{aligned} \tag{3.53}$$

where the quantity $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ includes the counter-gradient transport contribution [88] and is defined as :

$$\overline{\Sigma}_{\tilde{c}} = \overline{\Sigma} + \nabla \cdot ((\bar{c} - \tilde{c})\bar{\mathbf{n}}) \tag{3.54}$$

$\bar{\mathbf{n}} = -\nabla\tilde{c}/|\nabla\tilde{c}|$ is the vector normal to the resolved flame front and pointing towards the fresh gases. Equation (3.53) presents the following closures for the right-hand side : the turbulent diffusion of the flame surface density (I), the resolved (II) and the SGS parts of the strain rate (III), the resolved curvature (IV), the resolved propagation (V) and a destructive term combining SGS contributions of propagation and curvature (VI). The turbulent diffusivity $\widehat{\nu_T}$ and the SGS strain rate are evaluated at scale $\widehat{\Delta}$, which corresponds to the combustion filter size. The resolved strain rate is then not computed directly from the resolved velocity field $\tilde{\mathbf{u}}$ but from this field filtered at $\hat{\Delta}$, $\hat{\tilde{\mathbf{u}}}$, to ensure the same cut-off scale in the turbulence spectrum between the resolved and SGS parts of the flame strain. S_D, figuring in terms (IV) and (V), is the propagation speed of the flame front closed as : $S_D = \rho^u S_L/\bar{\rho}$. $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}^{lam} = |\nabla\tilde{c}| + (\bar{c} - \tilde{c})\nabla \cdot \bar{\mathbf{n}}$ includes both the laminar parts of the unresolved flux and flame surface density, Γ is the efficiency function proposed by Charlette *et al.* [31], $\beta_c = 4/3$ and $c^* = 0.5$ are modeling constants. Finally, the factor σ_c appearing in terms (I) and (III) is a control operator imposing a resolution of the turbulent flame brush at the combustion filter size $\widehat{\Delta}$. The classic progress variable of the ECFM-LES model is associated with the consumption of the fuel and rebuilt as :

$$\tilde{c}^{ECFM-LES} = 1 - \widetilde{Y_F^u}/\widetilde{Y_F^u|^u} \tag{3.55}$$

where $\widetilde{Y_F^u}$ is the mass fraction of fuel contained in the fresh gases of the cell while $\widetilde{Y_F^u|^u}$ is the same quantity conditioned in the fresh gases that is to say divided by the mass fraction of fresh gases. This conditioning method is detailed in Colin *et al.* [34].

Chemistry for FSD models

Flame surface density models are generally based on a simple description of chemical reactions through the flame using a single step scheme [35, 153, 17] :

$$\begin{aligned} C_xH_yO_z + \left((\alpha+1)\frac{x}{2} + \alpha\frac{y}{4} - \frac{z}{2}\right)O_2 \quad &\rightarrow \quad \alpha x CO_2 + \alpha\frac{y}{2}H_2O \\ &+ \quad (1-\alpha)\,xCO + (1-\alpha)\,\frac{y}{2}H_2 \end{aligned} \tag{3.56}$$

where α is a coefficient function of the local fuel air ratio. In this case the species reaction rates are directly linked to that of the progress variable and read :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = -\nu_i \frac{W_i}{W_F} Y_F^u|^u \widetilde{\dot{\omega}}_c \tag{3.57}$$

where W_i denotes the molar weight of species 'i' and ν_i is the stoichiometric coefficient of this species in the single step reaction (Eq. (3.56)).

Prediction of the turbulent flame speed

The analytical study of flamelet models was first proposed by Hakberg and Gosman [64] on the bases of Kolmogorov's method [85], called the KPP (Kolmogorov, Petrovsky, Piskunov) analysis. This approach considers the simple problem of the one-dimensional propagation of a steady flame in a frozen turbulent flow with constant density. Using a KPP

analysis, *a priori* expressions for the turbulent flame speed of algebraic FSD models can be determined, leading to the following equation for the Boger model [11] :

$$S_{T\ Boger}^{KPP} = \Xi^{eq} S_L \tag{3.58}$$

The KPP theorem was extended by Fichot *et al.* [53] and Duclos *et al.* [47] to models based on a transport equation for the FSD and then adapted by Richard *et al.* [133] to account for density variations through the flame. The application of this theorem to the ECFM-LES model provides the following expression for the turbulent flame speed :

$$S_{T\ ECFM-LES}^{KPP} = S_L + 2\sqrt{\frac{\widehat{\nu_T} < a_T >_s}{1 - \frac{\beta_c c^*}{1+\tau}}} \tag{3.59}$$

where $< a_T >_s$ refers to the SGS strain rate closure, $1 + \tau$ is the thermal expansion rate across the flame front [21] and β_c and c^* are two constants previously defined. Vermorel *et al.* [153] validated the reliability of the KPP expression for ECFM-LES against experimental data from Abdel-Gayed *et al.* [1]. These data were relative to the combustion of propane-air mixtures with varying fuel-air ratios and turbulent intensities. Steady one-dimensional flame cases were also performed with ECFM-LES to verify that the simulated turbulent flame front correctly propagated at the KPP velocity. In the present work, simulations are mainly based on methane-air flames and similar tests were then conducted using this fuel to check the correct response of Eq. (3.59), providing a good agreement with experimental values from Shy *et al.* [141] (Fig. 3.1).

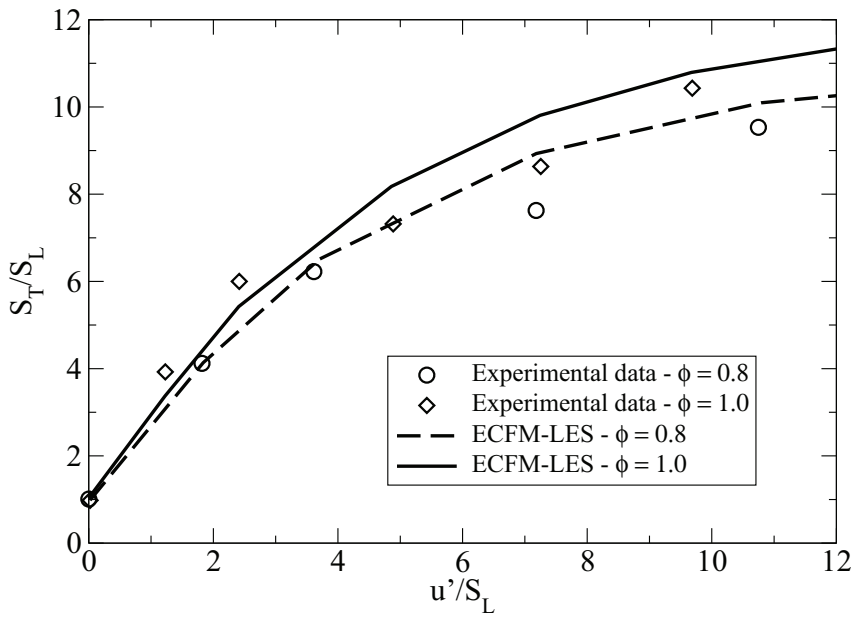


FIG. 3.1 – Evolution of the normalized turbulent flame speed as function of u'/S_l for different methane-air mixtures (fuel air equivalence ratios of 0.8 and 1.0) : comparisons between experimental data from Shy et al. [141] and ECFM-LES results given by the KPP theory : exp. points for ϕ=0.8. Line with circles : ECFM-LES for ϕ=0.8. Squares : exp. points for ϕ=1.0. Line with squares : ECFM-LES for ϕ=1.0

It should be noticed that, using Eq. (3.59) to define the equilibrium flame wrinkling for the algebraic model : $\Xi^{eq} = S_{T\ ECFM-LES}^{KPP}/S_L$, both Boger and ECFM-LES models give

the same turbulent flame speed in steady state cases. This expression of the equilibrium wrinkling is retained in this paper to compare algebraic and transport equation closures for the FSD.

3.6.2 Flamelet with presumed pdf (PCM-FPI)

Premixed flamelet chemistry tabulation (FPI-FGM)

Premixed flamelet chemistry tabulation for turbulent combustion modeling was discussed by Bradley *et al.* [20] and then recently revitalized in two equivalent formulations FPI (Flame Prolongation of Intrinsic Low Dimensional Manifolds) [62] and FGM (Flamelet-Generated Manifolds) [152]. In these methods, the inner structure of a laminar premixed flame is described from a single scalar, the progress variable, as it evolves monotically from the fresh gases state to the equilibrium one. For light hydrocarbons, this variable is often chosen as :

$$c = \frac{Y_{CO} + Y_{CO_2}}{Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq}} = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}} \tag{3.60}$$

where Y_i is the mass fraction of the ith species and the upperscript ^{eq} denotes the chemical equilibrium condition. After computations of unstrained and freely propagating steady laminar premixed flames with a complex chemistry software using detailed chemical and transport properties, flame thermochemical variables ψ (species mass fractions, reactions rates...) are stored as simple functions of the progress variable, $\psi = \psi^{FPI}(c)$, ensuring that c is a monotonically evolving variable so that every ψ can be expressed uniquely from c.

Presumed pdf as LES filters

In LES, the filtered thermochemical variables read [103] :

$$\overline{\rho}\widetilde{\psi}(\underline{x}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\underline{x}', t)\psi(\underline{x}', t)G_\Delta(\underline{x}' - \underline{x})d\underline{x}' \tag{3.61}$$

with G_Δ a space filter of characteristic size Δ. In PCM-FPI, it is assumed that the filtering operation can be expressed from the convolution of the progress variable pdf with the flamelet tabulated response :

$$\widetilde{\psi}(\underline{x}, t) = \int_0^1 \psi^{FPI}(c^*)\tilde{P}(c^*; \underline{x}, t)dc^* \tag{3.62}$$

where $\tilde{P}(c^*; \underline{x}, t)$ denotes the probability density function of the stochastic variable c^*. Following a well-established procedure, the pdf is presumed from its first two moments, $\widetilde{c}$ and $\widetilde{c^2}$ [14]. In a fully premixed system, the equivalence ratio is fixed and thus Y_c^{eq} also, then $\widetilde{c} = \widetilde{Y}_c/Y_c^{eq}$ and $\widetilde{c^2} = \widetilde{Y_c^2}/Y_c^{eq2}$. To calibrate the pdf with normalized quantities, the unmixedness factor $S_c = (\widetilde{c^2} - \widetilde{c}^2)/(\widetilde{c}(1-\widetilde{c}))$, varying between zero and unity, is introduced.

S_c relates to $Y_{cv} = \widetilde{Y_c Y_c} - \widetilde{Y}_c \widetilde{Y}_c$, the SGS variance of Y_c :

$$S_c = \frac{Y_{cv}}{\widetilde{Y}_c(Y_c^{eq} - \widetilde{Y}_c)} \tag{3.63}$$

$\widetilde{Y}_c$ and Y_{cv} are obtained from two balance equations [41] :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y}_c}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_c\right) = \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(D + D_T\right)\nabla\widetilde{Y}_c\right) + \bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c} \tag{3.64}$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{\rho}Y_{cv}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}Y_{cv}\right) &= \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(D + D_T\right)\nabla Y_{cv}\right) + 2\bar{\rho}D_T\left|\nabla\widetilde{Y}_c\right|^2 \\ &- 2\overline{s}_{\chi_{Y_c}} + 2\bar{\rho}\left(\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c} - \widetilde{Y}_c\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c}\right)\end{aligned} \tag{3.65}$$

where D and D_T are the laminar and SGS eddy diffusion coefficients, respectively, $\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c}$ and $\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c}$ are obtained from the look-up table using Eq. (3.62) and $\overline{s}_{\chi_{Y_c}}$ is the SGS scalar dissipation rate, which can be modeled with a linear relaxation hypothesis, previously used for LES of a premixed turbulent burner [59] :

$$\overline{s}_{\chi_{Y_c}} = \overline{\rho}C_D\frac{Y_{cv}}{\Delta^2/D_T} \tag{3.66}$$

An alternative is a combination of the Bi-Modal-Limit (BML) with the linear relaxation, introduced so far in nonpremixed and burned gases vitiated partially premixed combustion LES [42] :

$$\overline{s}_{\chi_{Y_c}} = (1 - S_c)\bar{\rho}C_D(D_T/\Delta^2)Y_{cv} + S_c\left(-\bar{\rho}D\left|\nabla\tilde{Y}_c\right|^2 + \overline{\rho\dot{\omega}_{Y_c}Y_c} - \frac{\overline{\rho\dot{\omega}_{Y_c}Y_c^{eq}}}{2}\right) \tag{3.67}$$

Once Eqs. (3.64)-(3.65) are solved, $\widetilde{c}$ and S_c are computed from $\widetilde{Y}_c$ and Y_{cv} to presume $\widetilde{P}(c^*; \underline{x}, t)$. Flame properties like the species reaction rates or mass fractions can then be obtained from Eq. (3.62) to compute the source term of Eq. (3.49) [61, 59].

Expression of the flame speed for PCM-FPI models

The KPP theorem can not be directly applied to PCM-FPI models, but a similar analysis may be performed to derive expressions for the corresponding turbulent flame speeds. For this purpose, the scalar φ_{Y_c} defined as : $\varphi_{Y_c} = (1 - S_c)\tilde{Y}_c(Y_c^{eq} - \tilde{Y}_c)$ should be considered. Its transport equation has indeed the advantage of being more convenient than Eq. (3.65) for Y_{cv} and reads in case of an homogeneous fuel air ratio [41] :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \bar{\rho}\varphi_{Y_c}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\varphi_{Y_c}\right) &= \nabla \cdot \left(\bar{\rho}\left(D + D_T\right)\nabla\varphi_{Y_c}\right) \\ &+ 2\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} + \bar{\rho}\left(Y_c^{eq}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c} - 2\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c}\right)\end{aligned} \tag{3.68}$$

where

$$\overline{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} = \overline{\rho}D|\nabla\widetilde{Y}_c|^2 + \overline{s}_{\chi_{Y_c}} \tag{3.69}$$

Considering the framework of a monodimensional steady flame evolving in a frozen turbulence and integrating Eqs. (3.64) and (3.68) along the x axis, a new set of equations can be obtained :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\bar{\rho}\tilde{u}\widetilde{Y_c}}{dx} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c} dx \tag{3.70}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} 2\bar{\rho}\widetilde{\chi}_{Y_c} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\left(2\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c} - Y_c^{eq}\tilde{\dot{\omega}}_{Y_c}\right) dx \tag{3.71}$$

Accounting for the mass conservation through the flame ($\bar{\rho}\widetilde{u} = \rho^u S_T$) and substituting Eq. (3.70) in Eq. (3.71), it comes :

$$S_{T_{PCM-FPI}} = \frac{2}{\rho^u {Y_c^{eq}}^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{\rho}\left(\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c} - \widetilde{\chi}_{Y_c}\right) dx \tag{3.72}$$

This expression shows that the turbulent flame speed is determined by the equilibrium between the scalar dissipation $\widetilde{\chi}_{Y_c}$, which needs to be closed, and the production term $\widetilde{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c}$, which depends on the local shape of the pdf. As alluded above, it is then difficult to anticipate the response of any PCM-FPI model to the SGS turbulent intensity. In addition, deriving an *a priori* expression for the turbulent flame brush thickness δ_T seems to be even more challenging. Consequently, these two quantities (S_T and δ_T) can not be controlled, which constitutes the major drawback of the classical PCM-FPI approach. The previous statements are illustrated in Fig. 3.2 where simulations of mono-dimensional steady flames propagating in a frozen turbulence are presented.

Comparisons are made between ECFM-LES and two PCM-FPI models based on different closures for the progress variable scalar dissipation rate (Eq. (3.66) and (3.67)). For this purpose, turbulent flame speeds and flame brush thicknesses are extracted from the calculations, the latter being evaluated using the maximal gradient of the filtered progress variable. In the simulations, SGS turbulent scales Δ and velocity fluctuations u' are imposed to compute the ECFM-LES source terms. The SGS turbulent viscosity used in the models' SGS turbulent fluxes is then reconstructed as : $\nu_T = Cu'\Delta$ (where C=0.12), this latter SGS quantity being the only one required for PCM-FPI computations. The turbulent scale Δ is taken equal to the grid size Δ_x for PCM-FPI and to the LES combustion filter size $\widehat{\Delta} = (10\Delta_x)$ for ECFM-LES, as it is the case in real LES. The proposed simulations then consist in *a priori* test-cases aiming at studying the SGS response of the models for fixed SGS flow conditions, all other things being equal. Nevertheless, it should be noticed that in these cases there are no resolved structures and consequently the resolved flame remains mono-dimensional. Therefore, the resolved wrinkling equals unity and no feedback of the resolved flame dynamics on the modeled SGS part is accounted for. In this sense, although LES models are used, these tests can be seen as RANS simulations, with integral length scales imposed at Δ, and discrepencies observed between the SGS models should be considered as a maximization of what would be observed in a real LES. Considering that the SGS strain rate of ECFM-LES is computed using an efficiency function based on DNS [31] and that this model well describes turbulent flame

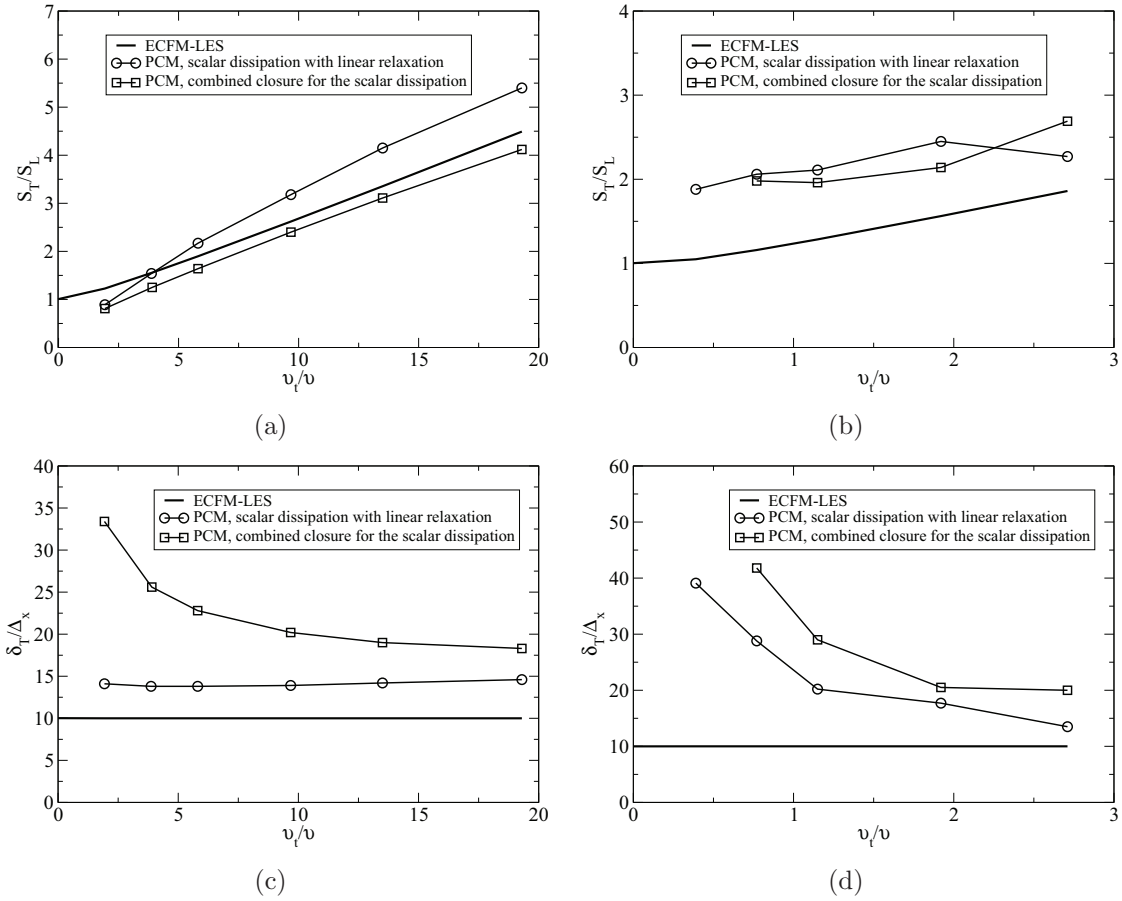


FIG. 3.2 – Simulations of 1D steady flames propagating in a frozen turbulence using PCM-FPI and ECFM-LES models (RANS context). Two closures of the SGS scalar dissipation rate (Eq. (3.66) and (3.67)) are tested for the PCM approach. Results are compared in terms of turbulent flame speed (S_T) and flame brush thickness (δ_T) for different SGS turbulent velocities and grid sizes. ν and ν_T correspond respectively to the laminar and SGS kinematic viscosities, the latter being computed as : $\nu_T = Cu'\Delta$ where C=0.12 and u' and Δ are imposed in the simulation. Top : normalized turbulent flame speeds for $\Delta_x = 0.5\ mm$ (a) and $\Delta_x = 0.1\ mm$ (b). Bottom : normalized flame brush thicknesses for $\Delta_x = 0.5\ mm$ (c) and $\Delta_x = 0.1\ mm$ (d).

speeds (Fig.3.1), its results can be viewed as reference ones. The simulations are first performed in conditions representative of current industrial configurations, *i.e.* with a grid size $\Delta_x = 0.5\ mm$ and normalized SGS velocity fluctuations u'/S_L ranging from 0 to 14. It is shown that turbulent flame speeds given by PCM-FPI models have the same trends and levels than those of ECFM-LES, provided the SGS viscosity is sufficiently high. In this case, the flame brush thickness is quite constant and about 15-20 Δ_x for PCM. This value is higher than those commonly used in models ensuring explicitly the flame front resolution control like ECFM-LES or TFLES, a behavior already noticed by Albouze *et al.* [4]. Nevertheless, the previous observations are not valid for the low SGS viscosity zone, where PCM-FPI models do not allow to obtain a correct flame propagation, providing flame speeds lower than the laminar one. This is because the unmixedness factor of the progress variable S_c is high and the corresponding reaction rates of the PCM-FPI table are very low. In addition, for very low values of u', it is more and more difficult to reach the convergence of the simulation even with a very refined look-up table in the high S_c zone, explaining why no data are represented for $\nu_T/\nu = 0$. This result indicates that in zones where the flow is quasi-laminar and the flame resolution is low, PCM-FPI could lead to flame extinction instead of a laminar propagation. Obviously, models based on SGS pdf must benefit from a resolution increase for low turbulence levels, to capture the asymptotic δ-function behavior of the pdf in the limit of laminar flames. A second set of simulations is also performed for a finer grid size $\Delta_x = 0.1\ mm$ considered as a possible future standard for LES of industrial systems. In this case, the SGS velocity fluctuations should be small compared to the previous one ($\Delta_x = 0.5\ mm$) and are here chosen assuming a constant kinetic energy dissipation in the inertial zone, which leads to values of u'/S_L ranging from 0 to 8. The results obtained with PCM-FPI models are similar to those of the first simulations : the turbulent flame speed correctly increases with the SGS velocity level and the flame brush thickness is higher than for ECFM-LES. However, for this new grid size, S_T/S_L is overestimated by a factor two with PCM-FPI even for low values of u', a behavior already observed by Vicquelin *et al.* [160]. This is because the unmixedness factor S_c decreases with the LES filter size and is here smaller than for the previous set of simulations. Finally, all these results suggest the existence of a 'functioning' zone for PCM-FPI models, which depends on the grid size ; this point is related to the existence of a departure between SGS scalar variance and SGS scalar energy, evolving with scalar characteristic scales and mesh properties [155]. For the parameters range where PCM-FPI predictions are reliable, the flame brush thickness and speed values are reasonable, but outside the PCM-FPI behavior is not reliable whatever the c scalar dissipation rate expression is. In practice, the limits of this zone mainly correspond to regions where the flow is weakly turbulent and the flame front is not well resolved. In this case, either the mesh resolution must be high enough to resolve the flame or the β-pdf shape of the progress variable should be replaced by another pdf, as discussed in the next section. However, because of the progress in computing capabilities and flow solvers, refining the mesh to increase the flame resolution lead to an extension of this zone where models's discrepancies vanish [106].

3.6.3 Hybrid presumed pdf and flame surface density closures

The following part proposes two models that combine explicitly the flame surface density $\overline{\Sigma}$ and PCM-FPI for modeling premixed combustion to overcome the lack of control of

the flame front thickness and velocity of the latter approach. The final expressions are summarized in Table 3.1.

TAB. 3.1 – Summary of the main equations of the proposed hybrid models.

Model	$\tilde{c}$	$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c$	$\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$	$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}$	S_c
PCM-Boger I	$1-\frac{\widetilde{Y_F^u}}{\widetilde{Y_F^u\|^u}}$	$\rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$	$\Xi^{eq}\frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\widehat{\Delta}}$	$\widetilde{\dot{\omega}}_c\left(Y_i^{eq}-Y_i^u\|^u\right)$	-
PCM-CFM I	$1-\frac{\widetilde{Y_F^u}}{\widetilde{Y_F^u\|^u}}$	$\rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$	Eq. (3.53)	$\widetilde{\dot{\omega}}_c\left(Y_i^{eq}-Y_i^u\|^u\right)$	-
PCM-Boger II	$\frac{\widetilde{Y}_{CO}+\widetilde{Y}_{CO_2}}{Y_c^{eq}}$	$\rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$	$\Xi^{eq}\frac{\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\widehat{\Delta}}$	$\frac{\widetilde{Y}_i^{PCM-FPI}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c,S_c)-\widetilde{Y}_i}{\gamma\delta_t}$	$1-\frac{\overline{\Sigma}d^*}{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})}$
PCM-CFM II	$\frac{\widetilde{Y}_{CO}+\widetilde{Y}_{CO_2}}{Y_c^{eq}}$	$\rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$	Eq. (3.53)	$\frac{\widetilde{Y}_i^{PCM-FPI}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c,S_c)-\widetilde{Y}_i}{\gamma\delta_t}$	$1-\frac{\overline{\Sigma}d^*}{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})}$

Strong coupling approach

The first approach corresponds to a strong coupling between FSD and pdf closures and is directly based on the relation linking these two formalisms.

Coupling principle

The starting point is the closure of the filtered reaction rate of the ith chemical species thanks to a statistical modeling :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t)=\int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}^{FPI}(c^*)\widetilde{P}(c^*;\underline{x},t)dc^* \tag{3.73}$$

The pdf of the progress variable is expressed using the BML formulation [26] :

$$\widetilde{P}(c^*;\underline{x},t)=\widetilde{\alpha}(\underline{x},t)\delta(c^*)+\widetilde{F}(c^*)+\widetilde{\beta}(\underline{x},t)\delta(1-c^*) \tag{3.74}$$

which introduces a budget for the fresh ($\widetilde{\alpha}(\underline{x},t)\delta(c^*)$), burning $\left(\widetilde{F}(c^*)\right)$ and burned gases $\left(\widetilde{\beta}(\underline{x},t)\delta(1-c^*)\right)$. The inner part of the pdf can be closed thanks to the relation between the FSD and the progress variable pdf proposed in [130, 154] :

$$\Sigma(c^*;\underline{x},t)=\left(\overline{|\nabla c|\mid c^*}\right)\overline{P}(c^*;\underline{x},t) \tag{3.75}$$

where $\left(\overline{|\nabla c| \mid c^*}\right)$ is the conditional filtered mean of the gradient through the flame. Using Eq. (3.75) and the relation $\tilde{P}(c^*;\underline{x},t) = \rho(c^*)/\bar{\rho}\overline{P}(c^*;\underline{x},t)$ [154], the pdf then reads :

$$\widetilde{P}(c^*;\underline{x},t) = \frac{\rho(c^*)}{\bar{\rho}} \frac{\Sigma(c^*;\underline{x},t)}{\left(\overline{|\nabla c| \mid c^*}\right)} \tag{3.76}$$

The local flame front is assumed sufficiently thin so that the iso-c^* stay parallel to each other, meaning the flame surface density associated to a given progress variable c^* is close to the generalized flame surface density : $\Sigma(c^*;\underline{x},t) \approx \overline{\Sigma}(\underline{x},t) = \overline{|\nabla c|}$. This hypothesis is related to the assumption of a c-gradient through the flame that stays close to $|\nabla c^*|^{FPI}$, its laminar reference value (thin reaction zone regime [122]). The pdf of the progress variable is then expressed as :

$$\widetilde{P}(c^*;\underline{x},t) = \widetilde{\alpha}(\underline{x},t)\delta(c^*) + \frac{\rho(c^*)}{\bar{\rho}} \frac{\overline{\Sigma}(\underline{x},t)}{|\nabla c^*|^{FPI}} + \widetilde{\beta}(\underline{x},t)\delta(1-c^*) \tag{3.77}$$

Considering that the burning rate vanishes at $c = 0$ and $c = 1$, the closure of the ith chemical species source term reads :

$$\begin{aligned} \widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) &= \int_0^1 \frac{\rho(c^*)\dot{\omega}_{Y_i}^{FPI}(c^*)}{|\nabla c^*|^{FPI}} \frac{\overline{\Sigma}(\underline{x},t)}{\bar{\rho}} dc^* \\ &= \frac{\overline{\Sigma}(\underline{x},t)}{\bar{\rho}} \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(\xi)\dot{\omega}_{Y_i}^{FPI}(\xi)d\xi \end{aligned} \tag{3.78}$$

ξ is a coordinate across the thin flame front. Integrating through a laminar one-dimensional flamelet the Y_i balance equation :

$$\rho^u S_L \frac{dY_i}{d\xi} = \frac{d}{d\xi}\left(\rho D_i \frac{dY_i}{d\xi}\right) + \rho\dot{\omega}_{Y_i} \tag{3.79}$$

where D_i is the diffusion coefficient, Eq. (3.79) becomes :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho\left(\xi\right)\dot{\omega}_{Y_i}\left(\xi\right)d\xi = \rho^u S_L\left[Y_i(\xi=+\infty) - Y_i(\xi=-\infty)\right] \tag{3.80}$$

The ith chemical species reaction rate finally reads :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) = \rho^u S_L \overline{\Sigma}(\underline{x},t)\left[Y_i^{eq} - Y_i^u|^u\right] \tag{3.81}$$

where $Y_i^u|^u$ is the mass fraction of the ith species conditioned in the fresh gases. Y_i^{eq} is extracted from the FPI look-up table and corresponds to the composition obtained at $c = 1$. This description of the chemistry is better than the classical CFM single step one as the burned gases equilibrium composition is *a priori* computed with a complex chemical scheme and depends on the FPI table inputs (pressure, temperature, fuel air ratio...). A well-known result is finally recovered as the filtered source term is proportional to the flame surface density times the integral of the burning rate through the flame, which relates to the laminar flame speed. The closure of the reaction rates is similar to the one proposed in the thesis work of Ghedhaifi [60] for RANS modeling.

Link with the Bray pdf based on the flamelet properties

The proposed closure may be linked to the recent work of Bray *et al.* [23], which presents a pdf based on the laminar flame properties as a potential alternative to the use of β-pdf. Other papers [76, 83] already made mention of its application. This pdf writes :

$$\tilde{P}^{Bray}(c^*;\underline{x},t) = \tilde{\alpha}'(\underline{x},t)\delta(c^*) + \tilde{\gamma}'(\underline{x},t)\tilde{f}'(c^*) + \tilde{\beta}'(\underline{x},t)\delta(1-c^*) \tag{3.82}$$

where the inner contribution $\tilde{f}'(c^*)$ is set to :

$$\tilde{f}'(c^*) = \frac{\rho(c^*)}{\bar{\rho}}\frac{C_1}{\left|\frac{dc}{d\eta}\right|} \tag{3.83}$$

In Eq. (3.83), η is a dimensionless spatial coordinate and C_1 a constant. Using the Bray closures for the coefficients of the pdf, it comes :

$$\tilde{\gamma}'(\underline{x},t)\tilde{f}'(c^*) = \frac{\rho(c^*)(1-S_c)\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\int_{0^+}^{1^-}\frac{\rho(c^*)c^*(1-c^*)}{|\nabla c^*|}dc^*}\frac{1}{|\nabla c^*|} \tag{3.84}$$

Comparing Eq. (3.77) to the Bray pdf expression, the following formulation for the filtered flame surface density is obtained :

$$\overline{\Sigma} = \frac{\bar{\rho}(1-S_c)\tilde{c}(1-\tilde{c})}{\int_{0^+}^{1^-}\frac{\rho(c^*)c^*(1-c^*)}{|\nabla c^*|}dc^*} = \frac{\bar{\rho}\varphi_c}{d^*} \tag{3.85}$$

where $\varphi_c = (1-S_c)\tilde{c}(1-\tilde{c})$ and $d^* = \int_{0^+}^{1^-}\rho(c^*)c^*(1-c^*)/|\nabla c^*|dc^*$. $\overline{\Sigma}$ appears to integrate information about the unmixedness factor of the progress variable *via* φ_c and a characteristic length scale of the laminar flame d^*. Consequently, provided the FSD is modeled, no unmixedness factor is needed anymore in the proposed model (Eq. (3.81)) and no balance equation should be solved for the progress variable SGS variance Y_{cv}. Also, it is not necessary to express the pdf shape explicitly (see Table 3.1).

Coupling with FSD models

When coupling FSD and PCM-FPI approaches, some numerical issues have to be regarded. FSD models rely on a filtering of the flame front at a scale $\hat{\Delta}$ so this latter is imposed in the chemical species mass fraction and energy equations. The thickness control parameter is also kept to compute the diffusive terms of these transport equations. In addition, the progress variable corresponds to the one defined in Eq. (3.55) and not to the classical FPI one (Eq. (3.60)). Finally, extending the counter-gradient transport to the transport equations of all chemical species [88], it comes :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) = \rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}(\underline{x},t)\left[Y_i^{eq} - Y_i^u|^u\right] \tag{3.86}$$

where $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ (Eq. (3.54)) can then be obtained either from an algebraic closure (Eq. (3.51)) or from a transport equation (Eq. (3.53)). In this paper, the corresponding hybrid models are called PCM-Boger I and PCM-CFM I respectively. These two models being based on the same progress variable and flame surface density closures than the original Boger [12] and ECFM-LES [134], the theoretical turbulent flame speeds are the same for the hybrid and non-hybrid models (see KPP analysis, Eq. (3.59)). This is illustrated in Fig. 3.3

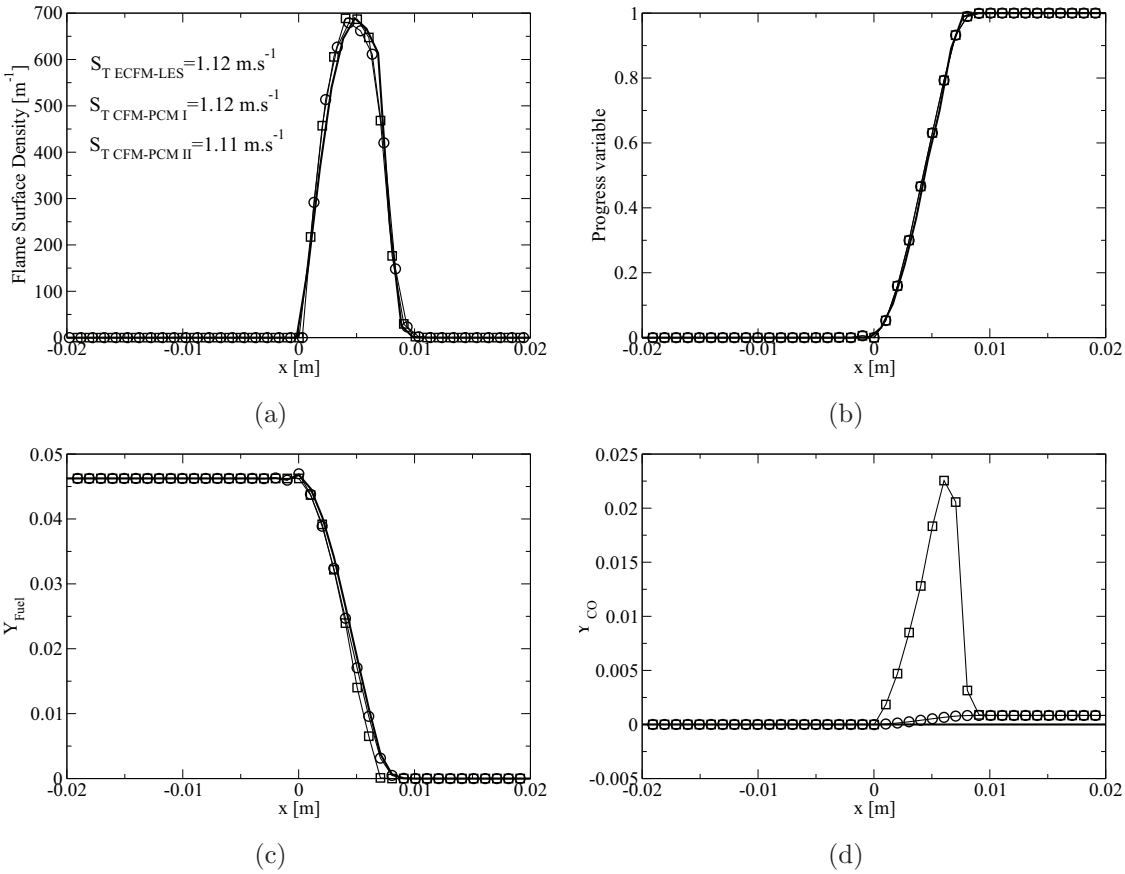


Fig. 3.3 – Simulations of 1D steady flames propagating in a frozen turbulence using ECFM-LES (bold line), PCM-CFM I (line with circle) and PCM-CFM II (line with squares) models. Results are compared in terms of FSD (a), progress variable (b) and fuel (c) and CO (d) mass fractions profiles.

where simulations of one-dimensional steady flames are compared for ECFM-LES and PCM-CFM I. The turbulent flame speed as well as FSD and progress variable profiles are nearly the same for both models. However, the composition of the species in the burned gases are different, the PCM-CFM I one being given by a FPI table and not a single step chemistry.

Weak coupling approach

The main limitation of the strong coupling approach is that it only gives access to the equilibrium burned gases state and does not accurately detail the inner chemical structure of the flame. This description may be sufficient in applications where the burned gases chemistry is predominant. This chemistry can indeed be described by a post-flame reaction model in the burned gases zone, defined by $c = 1$, including for instance CO evolution as well as NO_x formation processes. However, some limitations may arise when dealing with flame extinction or flame-wall interaction processes which can leed to the production of partially burned products. Another way to couple the flame surface density concept to the PCM-FPI model, which describes in details the chemical processes occurring in the flame front, is now presented.

Reaction rates formulation

In PCM-FPI the choice of a β-pdf to presume the distribution of the progress variable may not be relevant to model the propagation of a turbulent premixed flame as mentioned previously. Bray *et al.* [23] have discussed that for a given value of the filtered progress variable $\tilde{c}$, the filtered reaction rates obtained from a flamelet-based pdf or from a β-pdf may match provided the value of the unmixedness factor S_c^B is adequately chosen. The following principle may then be considered : PCM-FPI is coupled to a β-pdf and the unmixedness factor of the progress variable S_c^B is chosen to guarantee that the filtered reaction rate is equal to the one provided by another combustion model characterized by an accurate prediction of the turbulent flame speed :

$$\int_0^1 \rho\dot{\omega}_{Y_c}^{FPI}(c^*)\overline{P}(c^*,\tilde{c},S_c^B)dc^* = \overline{\rho\dot{\omega}}_{Y_c}^{Ref}(\tilde{c}) \tag{3.87}$$

Nevertheless, this link cannot be rigorously applied, as the reaction rate $\overline{\rho\dot{\omega}}_{Y_c}$ is not always a monotonous function of S_c. Furthermore, the local target reaction rate of progress variable $\overline{\rho\dot{\omega}}_{Y_i}^{Ref}(\tilde{c})$ may be higher than the maximum reaction rate that can be found in the look-up table. An *ad hoc* way to overcome this issue consists in setting the progress variable reaction rate to the local 'reference' reaction rate. Here, this quantity is closed thanks to a FSD model, that is to say :

$$\overline{\rho\dot{\omega}}_{Yc}^{Ref}(\underline{x},t) = \rho^u S_L \overline{\Sigma}(\underline{x},t)Y_c^{eq} \tag{3.88}$$

This expression has been shown to be identical to a closure of the filtered reaction rate by a flamelet-based pdf in the previous section. The highlighted link in Eq. (3.85) may be recast as :

$$S_c = 1 - \frac{\overline{\Sigma}\int_{0^+}^{1^-}\frac{\rho(c^*)c^*(1-c^*)}{|\nabla c^*|^{FPI}}dc^*}{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})} = 1 - \frac{\overline{\Sigma}d^*}{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})} \tag{3.89}$$

The parameter d^* is evaluated from the flamelet solution and its value is found to be weakly dependant of the chosen integration bounds. S_c being closed algebraically, no balance equation is needed anymore for the progress variable SGS variance. The filtered progress variable $\tilde{c}$ and unmixedness factor S_c fields being determined, the reaction rates of the ith chemical species are rebuilt from the tabulated species mass fractions, like proposed in the work of Galpin *et al.* [59] for the implementation of PCM-FPI in the AVBP code :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = \bar{\rho}\frac{\widetilde{Y}_i^{PCM-FPI}(\tilde{c}(\underline{x},t)+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t),S_c) - \widetilde{Y}_i(\underline{x},t)}{\gamma\delta_t} \tag{3.90}$$

In Eq. (3.90), δ_t is the time step of the CFD code and γ a parameter set to 5, as in [59]. This latter study showed that the formulation in Eq. (3.90) ensures mass conservation along with an accurate description of the chemical flame composition. The filtered progress variable $\tilde{c}$ is evaluated as $(\widetilde{Y}_{CO}+\widetilde{Y}_{CO_2})/Y_c^{eq}$, both for building the reaction rates and for the FSD model. Using Eq. (4.7) for evaluating the reaction rates of CO and CO_2 and summing them, it comes :

$$\begin{aligned}
\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c} &= \bar{\rho}\frac{\widetilde{Y}_c^{PCM-FPI}(\tilde{c}(\underline{x},t)+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t),S_c) - \widetilde{Y}_c(\underline{x},t)}{\gamma\delta_t} \\
&= \bar{\rho}Y_c^{eq}\frac{(\tilde{c}(\underline{x},t)+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t)) - \widetilde{c}(\underline{x},t)}{\gamma\delta_t} \\
&= \bar{\rho}Y_c^{eq}\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t)
\end{aligned} \tag{3.91}$$

This shows that the non-normalized progress variable $\widetilde{Y_c}$ is correctly produced at the rate imposed by the reaction rate of the FSD model.

Global model formulation
As for the strong coupling approach, mass fractions and energy equation are implicitly filtered at scale $\widehat{\Delta}$, using the turbulent diffusivity $\widehat{\nu_T}$, and a parameter σ_c is used in the unresolved transport terms to keep the flame brush thickness under control. In addition, the reaction rate of $\tilde{c}$ is set to $\bar{\rho}\widetilde{\omega}_c = \rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ in order to integrate the counter-gradient effects for the progress variable. However, the unmixedness factor is determined by Eq. (4.9), the pdf of Bray and the flame surface density being linked by $\overline{\Sigma} = \overline{\Sigma}_{\tilde{c}} - \nabla \cdot (\bar{c} - \tilde{c})\overline{\mathbf{n}}$.
Finally, $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ can once again be closed by Eq. (3.51) or Eq. (3.53) leading respectively to the PCM-Boger II and PCM-CFM II models. In both cases, $\widetilde{Y_c}$ being produced at a rate imposed by the FSD, the KPP analysis leads to the same turbulent flame speed as non-hybrid and strong coupling models (Eq. (3.59)). This is illustrated in Fig. 3.3 where simulations of one-dimensional flames are compared for ECFM-LES, PCM-CFM I and PCM-CFM II. The turbulent flame speed, FSD and progress variable profiles are very similar for all models, the main difference being in the description of the chemistry in the flame front. Notably, PCM-CFM I and PCM-CFM II indeed give the same composition in the burned gases, but the latter allows a finer description the species evolution in the reaction zone (CO for example). As explained previously, this is because PCM-CFM I only converts fuel and oxygen into burned gases at equilibrium while PCM-CFM II also describes chemical paths towards this chemical equilibrium in the flame front. Concerning ECFM-LES, its single step chemistry does not allow to reach reliable compositions in the burned gases, leading here to an absence of CO production through the flame.

3.7 LES of a turbulent fuel-lean premixed burner : the PRECCINSTA experiment

3.7.1 Experimental setup description

The considered configuration is a swirled-burner basically designed to study thermoacoustic instabilities [97]. An air flow crosses a plenum and enters the swirler where the fuel is injected. In our simulations the mixing process is assumed to be so fast that a perfectly premixed charge enters the combustion chamber to burn as made in the previous works [136, 59]. This hypothesis has been shown recently to be too strong for a very fine analysis of the burner [4]. Nevertheless, in order to perform a first comparison of the proposed combustion models, the homogeneous assumption should be sufficient. The combustion chamber is square-crossed to allow laser diagnostics. The burner operates at atmospheric pressure and the temperature of fresh gases is 300 K. Several types of flames have been observed depending on the equivalence ratio : at $\phi = 0.70$, the flame pulsates whereas at $\phi = 0.75$ or $\phi = 0.83$ it is stable. Among the available databases, the current work focuses on the flame at $\phi = 0.83$. For this case, mean and RMS values of mass fractions and temperature have been measured at eight streamwise positions, as illustrated in Fig. 3.4, with laser Ràmàn scattering.

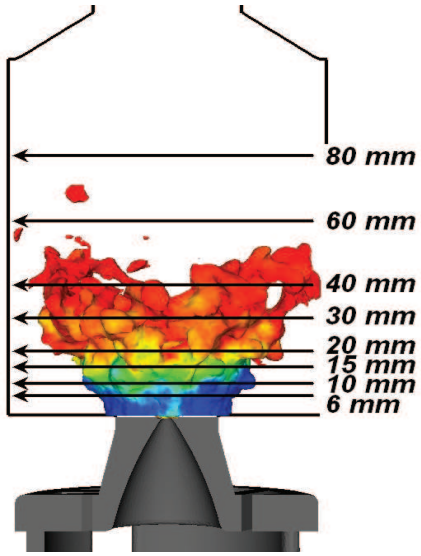


FIG. 3.4 – Location of probe lines for species and temperature measurements. In the font, the computed flame is figured by an isosurface characterized by a value $\widetilde{Y_c}^*$ colored by temperature. From [59].

3.7.2 Numerical approach

Computations are performed with the parallel solver AVBP [108] which solves the compressible Navier-Stokes and chemical species transport equations on structured and unstructured grids. The mesh is the one already used by Galpin *et al.* [59] and Roux *et al.* [136] and contains about 3 million tetrahedral cells. Concerning boundary conditions, the walls are assumed adiabatic and no-slip. A domain whose characteristic cells are coarsened compared to the ones in the combustion chamber is added to prevent the use of an outlet condition right at the exit of the chamber. The spatial numerical scheme used here is the Lax-Wendroff one, the SGS turbulent stresses are computed thanks to the WALE model [112]. Low-dimensional species trajectories in composition space are obtained from the simulation of a freely propagating premixed flame with the PREMIX software [78]. This simulation is performed using the GRI-mechanism [56] in the conditions of the PRECCINSTA experiment (atmospheric pressure and fresh gases temperature, $\phi = 0.83$). Look-up tables used in the computations are discretized as follows : 200 points for the progress variable $\tilde{c}$ and 31 for the unmixedness factor S_c, 10 of them being contained between S_c=0.9 and S_c=1. Exploiting the methodology of Galpin *et al.* [59] only a few species among the 53 of the GRI mechanism are stored : CH_4, CO, CO_2, H_2O, H, N_2, C_2H_2, O_2, H_2. The three latter species are defined thanks to atomic balances to ensure the mass conservation.

3.7.3 Simulations

Definition of the runs

As seen in Section 3.6.3, different coupling approaches and flame surface density closures may be used to describe simultaneously the turbulent flame propagation and chemical processes occurring in the flame front. Four simulations are then presented in this paper

to address :

- the prediction of the local turbulent flame speed in a realistic turbulent field according to different modelings(Table 3.1) :
  - using an equilibrium value of the flame surface density to properly stabilize the flame (model PCM-Boger I) ;
  - using a transport equation for this quantity and investigating the history effects when modeling a quasi-steady flame (models PCM-CFM I and II) ;
  - using a β-pdf (model PCM-FPI with a linear relaxation expression for the progress variable scalar dissipation rate [59]).
- the description of chemical processes occurring in the turbulent flame brush obtained by each tabulation method (models PCM-CFM I, PCM-CFM II, PCM-FPI).

For a better clarity of the graphs and in order to avoid any redundance of information, results from PCM-Boger II are not shown. They are indeed similar to those of PCM-Boger I for the flame position, while giving a description of the species evolution through the reaction zone close to PCM-CFM II. Concerning the exploitation of the measurements, Galpin *et al.* [59] explained that laser diagnostics data are associated with filter sizes ; for temperature and mass fraction fields, the experimental filter width is smaller than the LES one which means the resolved RMS, expressed as : $Y_i'^2|_{RES} =< \widetilde{Y_i}\widetilde{Y_i} > - < \widetilde{Y_i} >< \widetilde{Y_i} >$ should remain below the experimental curves. A total RMS fluctuation was written as : $Y_i'^2|_{RES+SGS} =< \widetilde{Y_iY_i} > - < \widetilde{Y_i} >< \widetilde{Y_i} >$ where the first averaged quantity is defined *via* the pdf :

$$\widetilde{Y_iY_i} = \int_0^1 Y_iY_i(c^*)\tilde{P}(c^*)dc^* \tag{3.92}$$

This latter formulation is compatible only with models PCM-CFM II and PCM-FPI as a SGS pdf is explicitly used in these models and corresponding results are shown. For the sake of clarity, the hybrid models are first compared between them to highlight the best one. Simulations obtained with this model are then confronted to those of Galpin [59] with PCM-FPI.

Hybrid models simulations

Figure 3.5 represents the fields of the time-averaged quantity $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ closed algebraically (PCM-Boger I) or with the solution of the a transport equation (PCM-CFM I).

The fields are well differenciated : the time-averaged flame being shorter and wider downstream the nozzle for PCM-Boger I than for PCM-CFM I, which corresponds to a less stable flame. This is because PCM-Boger I supposes an instantaneous equilibrium of the SGS flame wrinkling with the current turbulent flow field, then leading to an immediate response of the flame to the flow unsteadiness, whereas the transport equation of PCM-CFM models reproduces the physical and progressive flame surface evolution piloted by the strain and convection phenomena. This is confirmed in Figs. 3.6 and 3.7 representing

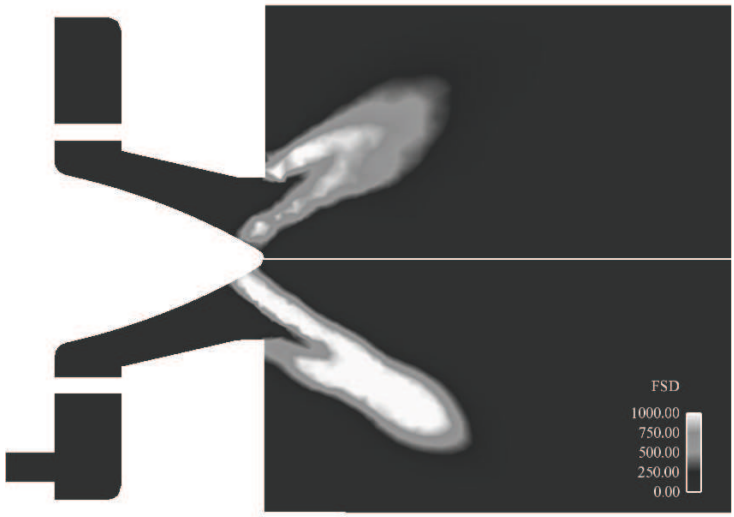


FIG. 3.5 – Fields of the averaged flame surface density $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ for PCM-Boger I (top) and PCM-CFM I (bottom).

temperature and methane mass fraction profiles, which highlight a good capture of the flame location for PCM-CFM models, whereas PCM-Boger I corresponds to a V-shape too narrow and branches too wide compared to experimental data. However, it should be noticed that for all the models, the temperature of burned gases is overestimated near the wall as heat losses are not taken into account in the simulations. Concerning the time-averaged mass fractions of minor species like CO (Fig. 3.8), the limitation associated with the strong coupling models is clear : as the chemical path along the progress variable is not taken into account, (*i.e.* the peak of CO in the laminar flame front) these runs only predict low levels. On the contrary, PCM-CFM II represents the complete chemical trajectory leading to very correct results. However, the experiment does not show an external radial peak of CO for 6.0, 10 et 15 mm, contrary to PCM-CFM II : this is because the injection of fuel is not modeled here leading to an important overestimation of the fuel-air ratio for high radii.

Regarding resolved RMS results, due to filtering considerations previously addressed, the LES profiles should stay below the experimental ones. This requirement is correctly satisfied for PCM-CFM models which again give very similar profiles for the temperature and CH_4 mass fractions (Figs. 3.9 and 3.10) with a proper reproduction of experiments. PCM-Boger I RMS profiles also mostly stay below the experimental data, but higher values are obtained compared to PCM-CFM I and II, encouraged by its immediate response to the flow unsteadiness previously discussed. These profiles are then very close to experimental ones, while the filter size is different, so that it is inferred that the resolved RMS is overpredicted by PCM-Boger I.

Finally, all the hybrid models represent the correct shape of the flame, even if the transported flame surface density gives the more accurate results. Notably, temperature mean and RMS profiles are close to experimental points indicating a good prediction of the turbulent flame propagation. In addition, strong coupling models appear as satisfying solutions for predicting species for which the variation is monotonic across the flame front (CH_4, CO_2, O_2, H_2O), but can not describe the evolution of minor species like CO.

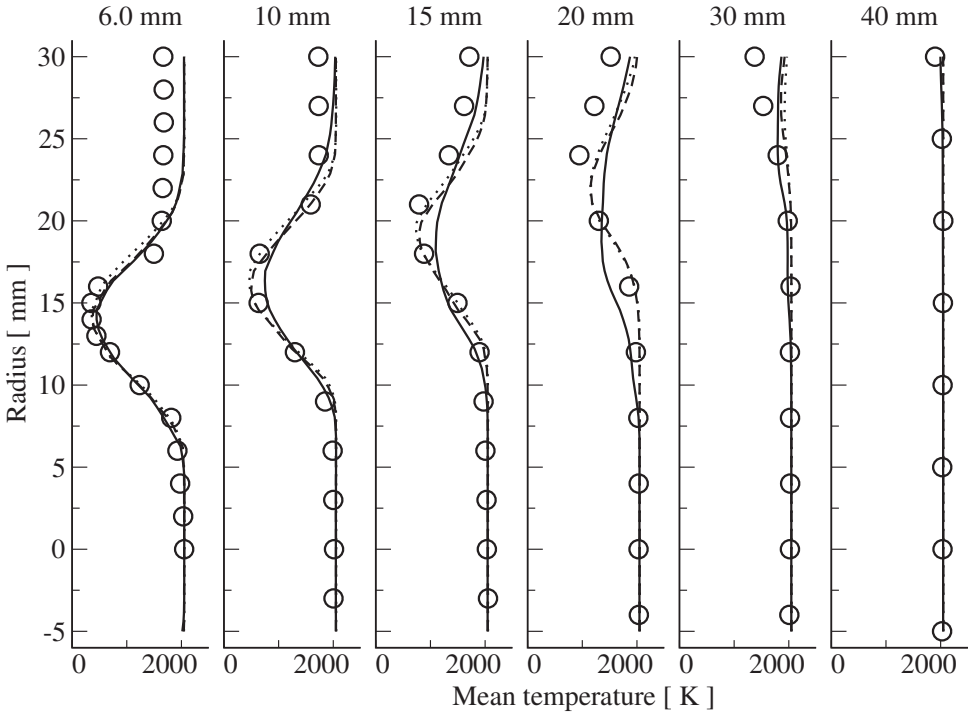


FIG. 3.6 – Averaged temperature - symbols : experiment, line : PCM-Boger I, dots : PCM-CFM I, dashed line : PCM-CFM II.

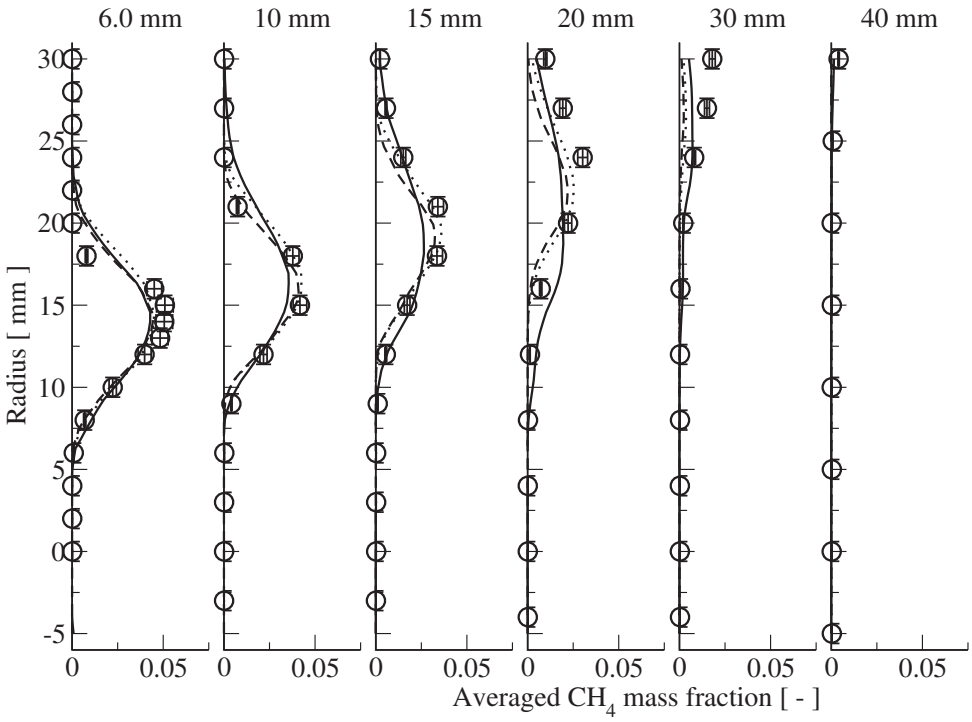


FIG. 3.7 – Averaged CH_4 mass fraction - symbols : experiment, line : PCM-Boger I, dots : PCM-CFM I, dashed line : PCM-CFM II.

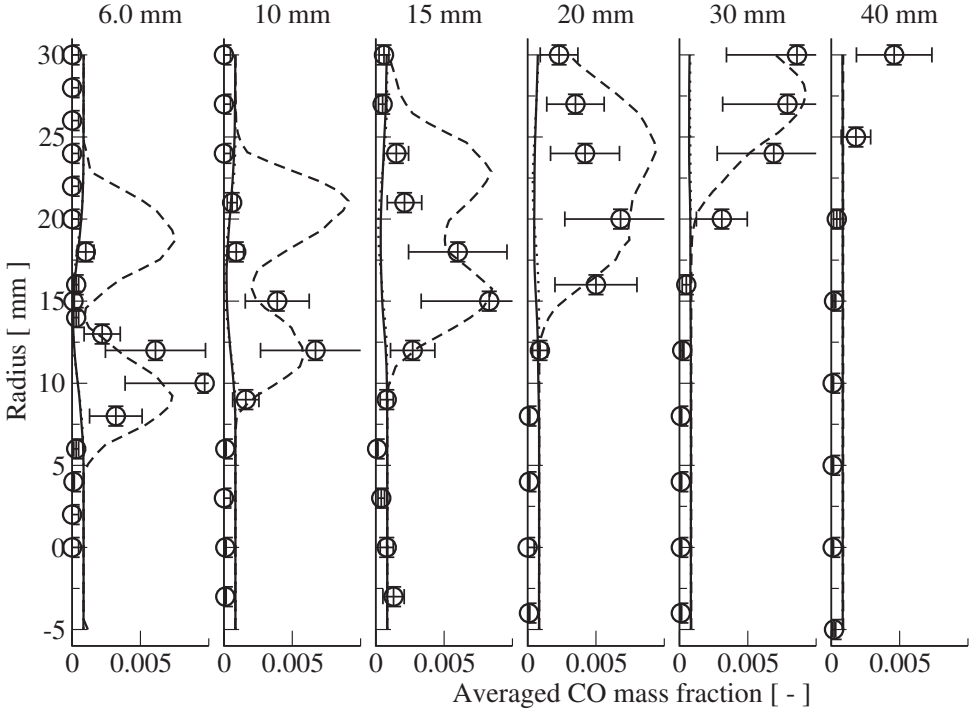


Fig. 3.8 – Averaged CO mass fraction - symbols : experiment, line : PCM-Boger I, dots : PCM-CFM I, dashed line : PCM-CFM II.

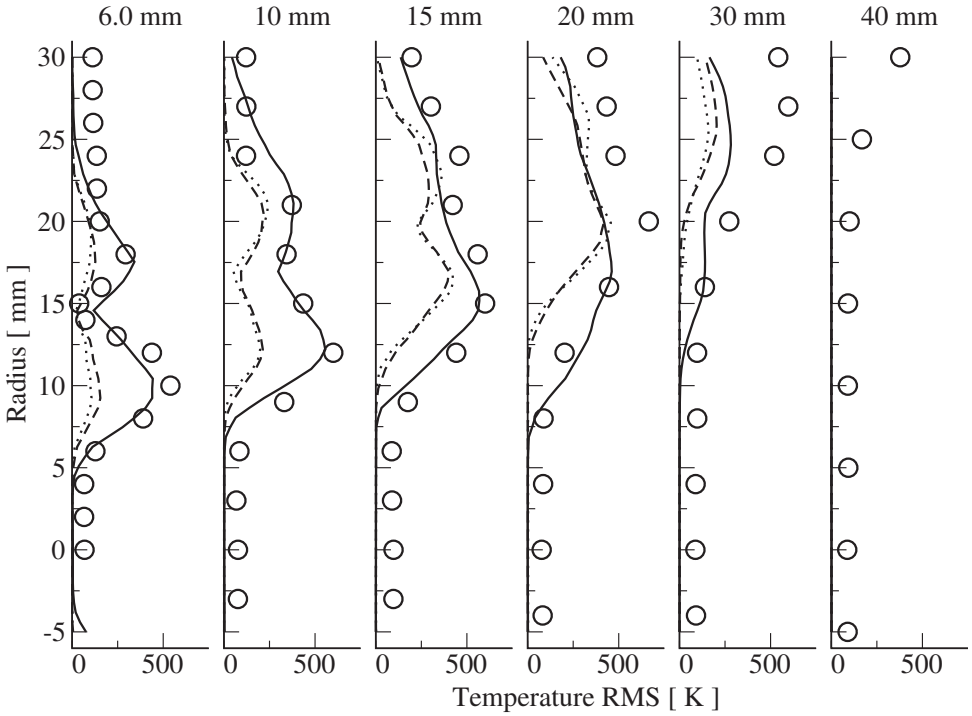


Fig. 3.9 – RMS temperature - symbols : experiment, line : resolved RMS from PCM-Boger I, dots : resolved RMS from PCM-CFM I, dashed line : resolved RMS from PCM-CFM II.

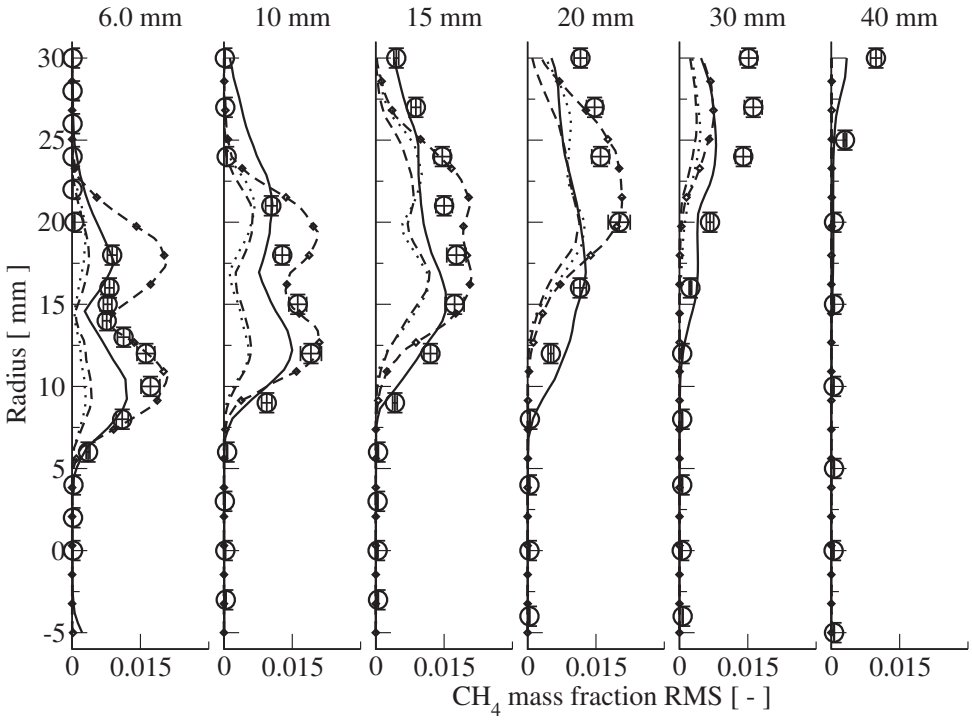


Fig. 3.10 – RMS of CH_4 mass fraction - symbols : experiment, line : resolved RMS from PCM-Boger I, dots : resolved RMS from PCM-CFM I, dashed line : resolved RMS from PCM-CFM II.

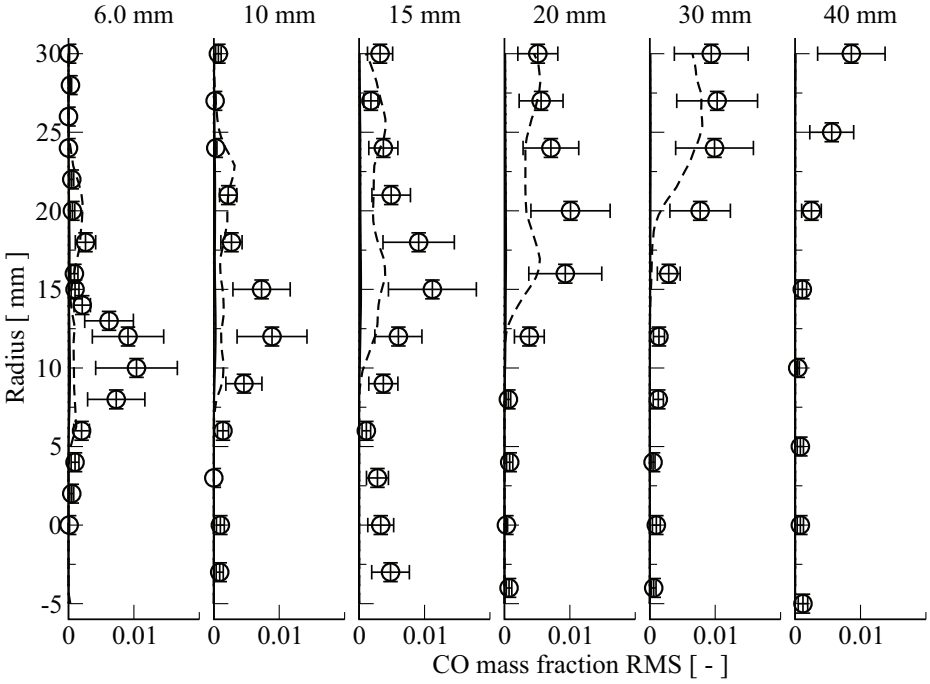


Fig. 3.11 – RMS of CO mass fraction - symbols : experiment, line : resolved RMS from PCM-Boger I, dots : resolved RMS from PCM-CFM I, dashed line : resolved RMS from PCM-CFM II.

PCM-CFM II efficiently compensates this lack, thanks to the tabulation of the chemical trajectory.

Comparison with PCM-FPI

For the sake of clarity, only PCM-CFM II, which combines a good description of the turbulent flame propagation and of chemical paths in the flame front, is confronted to the classical PCM-FPI model. Figure 3.12, which represents fuel mass fraction mean profiles, shows a slightly better location of the flame (*i.e.* an open angle relative to the symmetry axis) for the hybrid model than the one associated to PCM-FPI, even if the trends are quite similar. This is also the case for CO results (Fig. 3.13), suggesting a more precise description of the local turbulent flame speed when using a flame surface density based approach than a β-pdf one. RMS envelopes bounded by resolved and total RMS are also presented in Figs. 3.14 and 3.15. A similar capture of the experimental points is observed with both models, but the RMS are underestimated for the extreme downstream location with PCM-CFM II. This is because the flame is slightly shorter for the PCM-CFM II than for the PCM-FPI (Fig. 3.12).

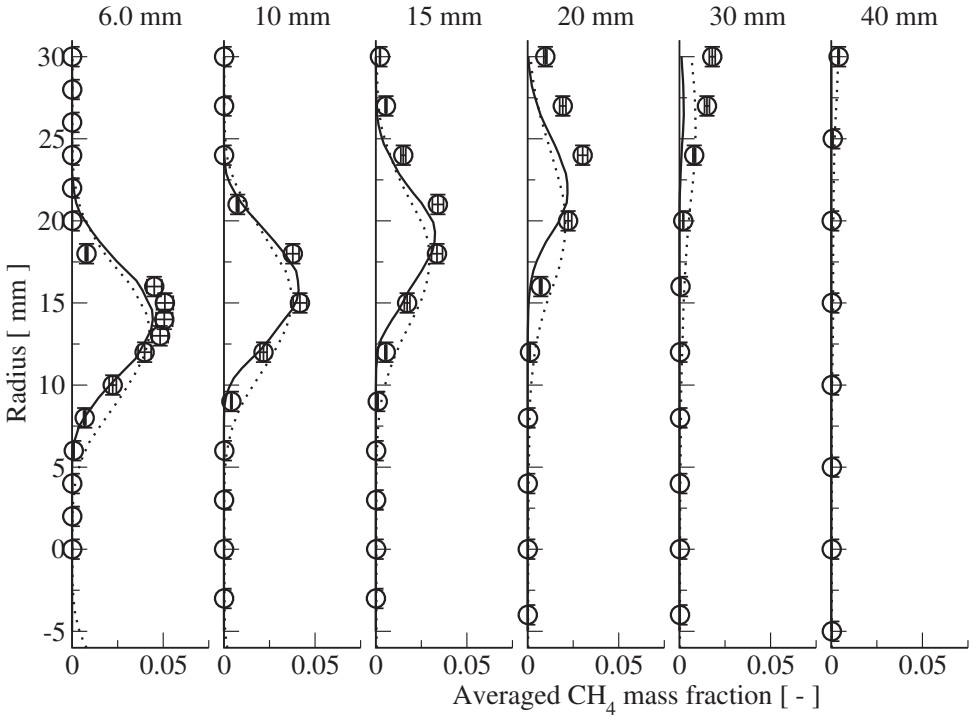


FIG. 3.12 – Averaged CH_4 mass fraction - symbols : experiment, line : PCM-CFM II, dots : PCM-FPI.

Finally, PCM-FPI gives results globally close to the ones obtained with PCM-CFM II, despite the predicted reaction rates are theoretically different. In order to better understand these results, *a posteriori* tests are led as follows : steady one-dimensional flames are computed with a characteristic mesh size of 1.2 mm (as in the PRECCINSTA experiment). These runs are carried out for several levels of turbulent viscosity extracted from the reacting zone of an instantaneous LES field (the viscosity field chosen here comes from

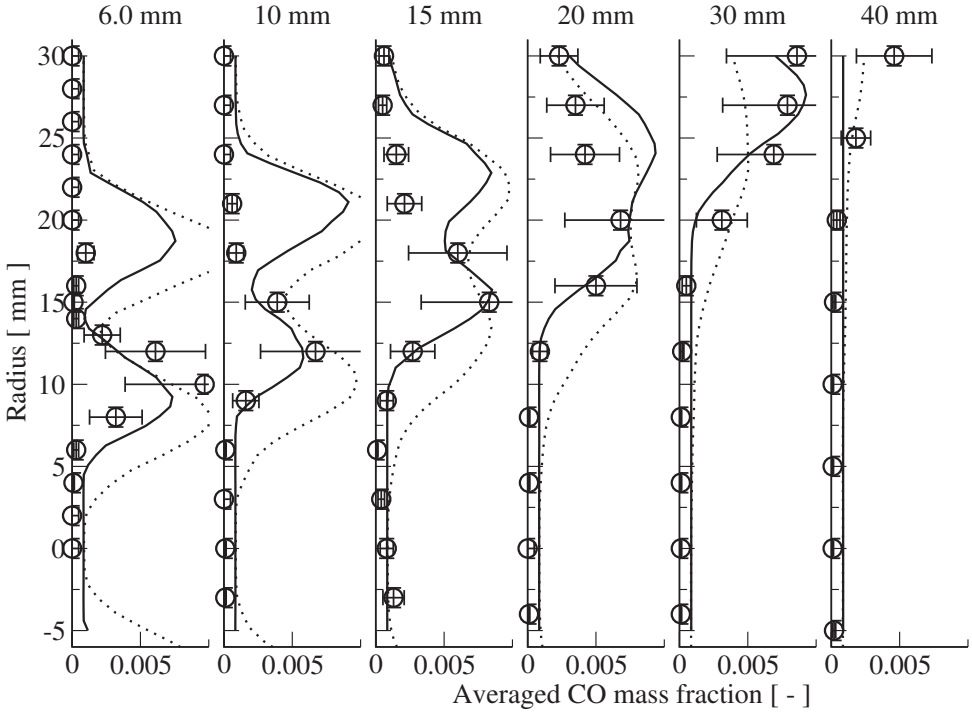


Fig. 3.13 – Averaged CO mass fraction - symbols : experiment, line : PCM-CFM II, dots : PCM-FPI.

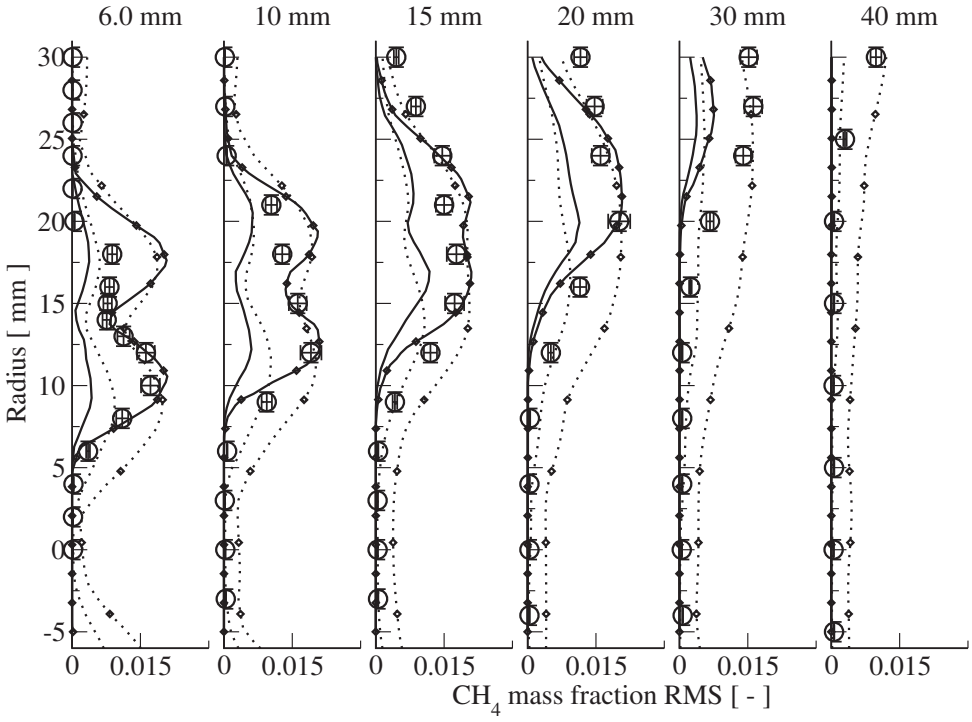


Fig. 3.14 – RMS of CH_4 mass fraction - symbols : experiment, line : resolved RMS from PCM-CFM II, line with symbols : total RMS from PCM-CFM II, dots : resolved RMS from PCM-FPI, dots with symbols : total RMS from PCM-FPI.

the PRECCINSTA simulation with PCM-CFM II). The associated burning rates may be regarded as the propagating speed normal to the local flame front, assuming constant mesh size and turbulent viscosity across it. Normalized turbulent flame velocities obtained from these 1D simulations are plotted for PCM-FPI and PCM-CFM II in Fig. 3.16. It is shown that for a given ν_T, the values associated to these models are different but keep the same order of magnitude. It then seems that the SGS velocity fluctuation levels and grid size found in the PRECCINSTA simulations lead to apply PCM-FPI in its functioning zone, which may be the case for many burners.

3.8 Concluding remarks

Recent works have been dedicated to the implementation of realistic chemistry in LES of premixed combustion using presumed β-pdf and tabulated chemistry [42, 59, 58, 4], leading to the PCM-FPI model. However, the β-shape of the pdf was found not to be the optimal choice to describe reaction rates in premixed flames [41, 23, 76, 160]. On the other hand, flame surface density approaches have been developped to predict precisely the turbulent flame propagation [12, 66, 134], but are based on a very simple description of chemical processes with a single step reaction. The objective of this work was to develop hybrid models combining the complex chemistry part of PCM-FPI with a description of the progress variable reaction rate using the FSD concept. The theoretical basis of the two approaches were first recalled and the advantages and drawbacks of each were discussed. Notably, the lack of control of the turbulent flame brush and velocity, with PCM-FPI, was highlighted. This result was illustrated by simulations of one-dimensional turbulent flames propagating in a frozen turbulence and a 'functioning zone' of the PCM-FPI model was observed both in terms of grid size and SGS velocity fluctuation, in agreement with recent studies on SGS scalar energy modeling [155]. Two hybrid approaches were then proposed. The first one is based on a strong coupling where the inner part of the pdf is directly expressed as a function of the filtered flame surface density. In this BML description, only the fresh and burned gases compositions are required to define the species reaction rates and the chemical path through the flame is not depicted. The second approach is more *ad hoc* and relies on a weak coupling between PCM-FPI and the FSD concept. Here, the progress variable reaction rate is indeed not given by the FPI-table but computed as the product of the laminar flame speed and the flame surface density. The species consumption rate is then computed as proposed by Galpin *et al.* [59] for the PCM-FPI model, leading to a more realistic evolution of the gases composition in the flame. Finally, for both types of couplings, the flame surface density can be provided either by an algebraic closure as the one proposed by Boger *et al.* [12], or by a transport equation (ECFM-LES model [134]), the latter solution being more adapted to unsteady configurations. This results in four different models, two for the strong coupling called PCM-Boger I and PCM-CFM I, and two for the weak one called PCM-Boger II and PCM-CFM II. For all these models, a KPP analysis can be performed, resulting in the same theoretical expression for the steady state turbulent flame speed. The proposed models were then tested on the experimental setup PRECCINSTA, for which statistical measurements of chemical species and temperature are available. PCM-Boger I gave good results for the location of the flame and major species evolution but a flame surface density evaluated from the ECFM-LES transport equation (PCM-CFM I) clearly improved these results. This is

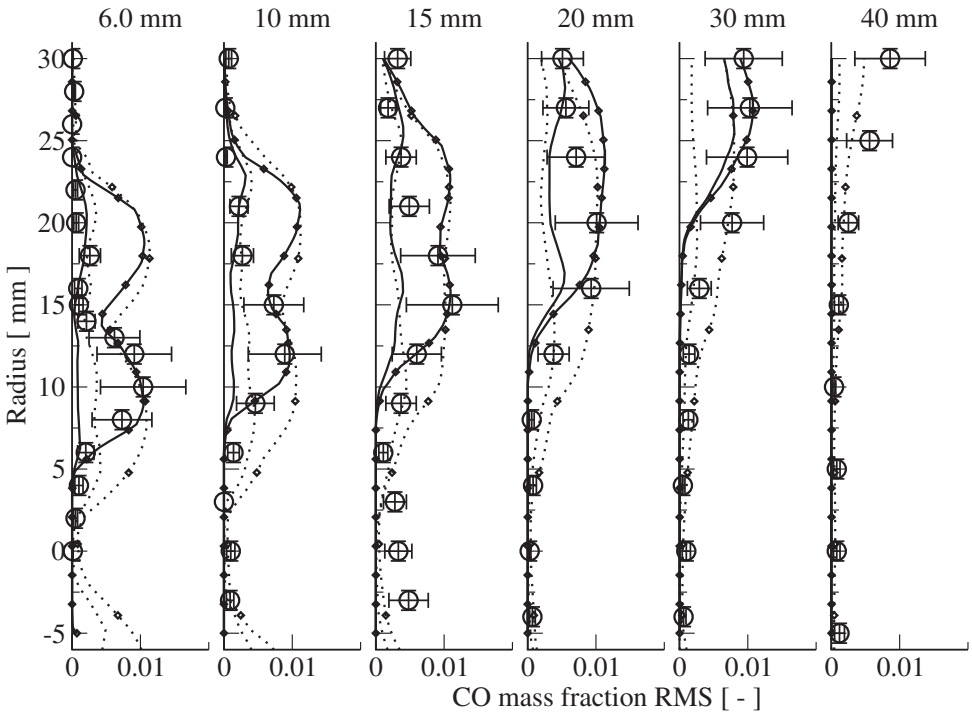


Fig. 3.15 – RMS of *CO* mass fraction - symbols : experiment, line : resolved RMS from PCM-CFM II, line with symbols : total RMS from PCM-CFM II, dots : resolved RMS from PCM-FPI, dots with symbols : total RMS from PCM-FPI.

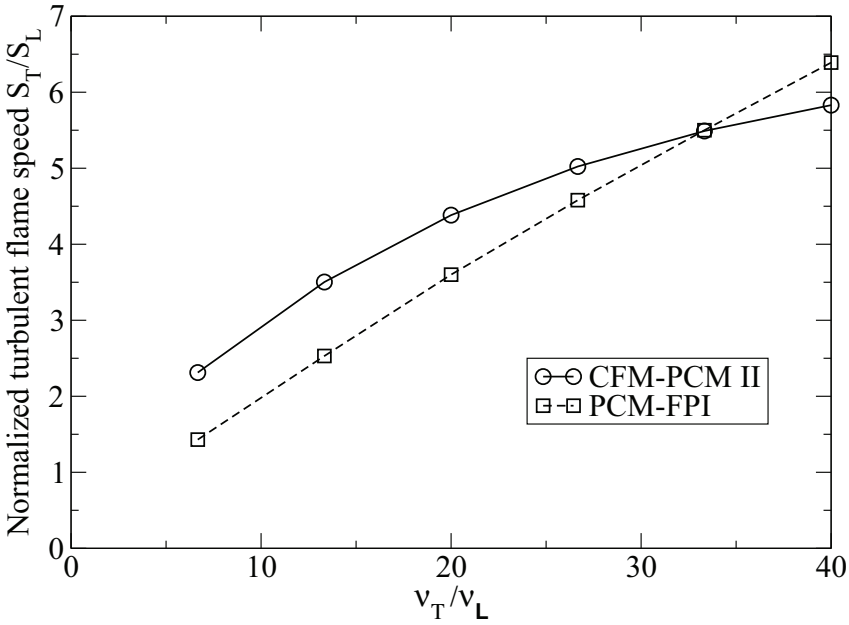


Fig. 3.16 – Normalized turbulent flame speed levels encountered in the PRECCINSTA experiment as function of the local turbulent viscosity.

because the second FSD closure accounts for the progressive production and convection of the flame surface downstream the injector nozzle, while the first one assumes the local equilibrium of the flame wrinkling. PCM-CFM II, which integrates the tabulation of the chemical trajectories, provided the same results as PCM-CFM I for major species but gave more proper levels of CO compared with experiments. Its results were then compared to those previously obtained by Galpin *et al.* [59] with PCM-FPI. Despite of its lack of control of the local turbulent flame speed, the classical PCM-FPI gives results quite close to PCM-CFM II. This was explained by the fact that the local turbulence properties in the flame front are within those of the 'functioning zone' of beta-presumed pdfs applied to turbulent premixed flame propagation, which means a reasonable prediction of reaction rates. Because of the forthcoming progress in computing capabilities, refining the mesh to increase flame fronts resolution can, however, lead to an extension of this functioning zone ; so that the asymptotic δ-function pdf behavior is properly captured by the mesh, then discrepancies between the models should be reduced [106].

3.9 Conclusion

Des inconvénients associés à la modélisation PCM-FPI pour la propagation de flamme en richesse homogène ont tout d'abord été présentés.
En effet, la vitesse de flamme turbulente intrinsèque à la modélisation est difficilement contrôlée et il a été montré [23] que le choix d'une β-pdf n'était pas forcément le plus optimal pour modéliser la distribution de la variable d'avancement.
A partir des ressources bibliographiques, deux modélisations alternatives intégrant la chimie tabulée et la notion de surface de flamme ont été proposées.
Dans le cadre de la première partie d'un article, des tests de principe ont été réalisés pour comparer les capacités de prédiction de PCM-FPI et des modèles proposés en terme de vitesse de flamme. Enfin, des calculs de validation sur la flamme de laboratoire PRECCINSTA ont montré des niveaux de prédiction équivalents pour les espèces chimiques entre PCM-FPI et les nouveaux modèles.

Chapitre 4

Allumage par bougie

Ce chapitre est constitué par un second article soumis à *Combustion and Flame*.
Les aspects instationnaires de la combustion turbulente sont ici investigués au travers de la problématique spécifique au moteur essence qu'est l'allumage par bougie. Les modèles couplés PCM-CFM I et II décrits au chapitre précédent sont couplés à un modèle d'allumage, testés sur des cas simples puis validés sur une manipulation expérimentale. Leur comportement est à chaque fois confronté à celui du modèle PCM-FPI.

4.1 Introduction

The continuous increase in computing power and recent progress in Sub-Grid Scale (SGS) modeling are promoting Large-Eddy Simulation (LES) to the status of a regular tool for turbulent combustion modeling. In the previous part [88], combustion SGS models ensuring propagation of an established turbulent flame front, preserving flame speed and characteristic flame thickness, were investigated. In many combustion systems, the fully developed turbulent propagation is preceded by a forced ignition, this point is discussed in this second part. The details of the spark-ignition sequence can drastically influence the subsequent combustion history, and the internal combustion engines literature [77, 6, 68] underlined the correlation between the cycle-to-cycle variability of the pressure evolution and the spark-ignition phase. Recent studies were also devoted to spark-ignition in gas turbines and related burners [13, 86, 3, 144], as the ignition sequence may simply fail for these applications or potentially generate dangerous pressure fluctuations. Numerous numerical models have already been proposed to account for spark-ignition related phenomena, which cannot be resolved by the grid. This can be done for instance by solving the transport equation for the scalar dissipation rate that is completed by a submodel assuming the birth of a propagating spherical flame [94]. Other submodels devoted to the ignition phase have been coupled to the level-set method, where particles were used to mark the flame surface position [147] and expressions for the corresponding turbulent flame velocity were proposed [52]. In the specific case of LES, the propagation of a spherical flame in an homogeneous isotropic turbulence may be modeled with the transport of the flame front wrinkling [114] and the simulation of a laser ignition has been addressed *via* a deposit of energy coupled to the combustion model TFLES [36, 86]. The parameters driving success or failure of full ignition of a bluff-body burner were also studied with LES [144], and simulations validated against experiments [3].

The aim of the current work is to investigate the response to sparking of the submodels coupling premixed flamelet tabulation with presumed SGS probability density function (PCM-FPI) and flame surface density transport (ECFM-LES). In previous works [134], it was discussed how formulating an equilibrium state assumption for the wrinkling factor led to a significant overestimation of the early flame growth rate. Even though PCM-FPI has no specific ingredient for accurately controlling the steady turbulent flame speed [88], it does not imply such an equilibrium approximation and this model is thus also tested in this study. In a first section, details are given about the spark-ignition modeling, notably AKTIM-LES (Arc and Kernel Tracking Ignition Model for LES) [134] and the way it may be coupled to the turbulent flame closures considered. Canonical test cases are first examined, then an experimental setup is simulated [131], to estimate the prediction capability of the various approaches. Finally, a synthetic condition more representative of highly turbulent flows often found in industrial configurations, like piston engines or gas turbines, is studied to further assess the modeling.

4.2 Modeling spark-ignition

In modeling based on steady-state flamelet tabulated chemistry, as PCM-FPI [156, 42, 59, 144], the chemical reactions are traced from a progress variable that is associated to vanishing chemical sources in fresh gases at room temperature and there is no ingredient to initiate combustion aside from the artificial introduction of burned gases, and the same is true for closures uniquely grounded on flame surface density (FSD) [134]. To overcome this shortcoming, the AKTIM-LES [134] procedure is retained in this paper for modeling the early flame growth, with the flame surface density concept.

4.2.1 AKTIM-LES

AKTIM for LES was obtained from adaptations brought to an original formulation developed for Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) computations [46]. It relies on the description of three successive phases : (1) the deposit of a spherical progress variable kernel at a given spark time ; (2) the growth of that kernel ; (3) the transfer of the flame surface density field to the flame propagation based model ECFM-LES. For the first phase, the deposited spherical profile of progress variable ($c = 0$ in fresh gases and $c = 1$ in fully burned products) is filtered to enable its resolution by the mesh, which could be coarse on given computations. It writes :

$$\tilde{c}(\underline{x}, t_{spark}) = \frac{c_0}{2}\left(1 - tanh\left(\frac{\underline{x} - \underline{x}_{ign}}{\delta_{ign}}\right)\right) \tag{4.1}$$

In this expression, c_0 is an arbitrary chosen small parameter, $\underline{x}_{ign}$ is the location of the spark plug and δ_{ign} is the filter size at spark timing. Concerning c_0, it has been checked that results weakly depend on this parameter, as long as it remains sufficiently small, typically $c_0 \leq 10^{-4}$. During the second step, the total flame surface $S_{tot}(t)$ is expressed as :

$$S_{tot}(t) = \Xi^{tot}(t) S_{mean}(t) \tag{4.2}$$

$S_{mean}(t)$ is the surface surrounding the burned gases volume $V_b(t)$. As in the BML theory [26], an intermittence between fresh and burned gases is assumed and their respective

volumes in a given cell are approximated as $1-\bar{c}(\underline{x},t)$ and $\bar{c}(\underline{x},t)$. The global burned gases volume is then known from : $V_b(t) = \int_V \bar{c}(\underline{x},t)dV$, estimated overall the computational domain. Keeping the hypothesis of a spherical kernel shape, a radius $r_b(t)$ associated to this volume is deduced. The mean flame surface $S_{mean}(t)$ is then defined as the sphere whose characteristic radius is $r_b(t)$. The total wrinkling factor $\Xi^{tot}(t)$ in Eq. (4.2) can be written as : $\Xi^{tot}(t) = \Xi^{spk}(t)\Xi^{res}(t)$. The first quantity $\Xi^{spk}(t)$ is the flame wrinkling within the filter size $\hat{\Delta}$. It is determined from a zero-dimensional modeling and its unsteady equation reads :

$$\frac{d\Xi^{spk}}{dt} =< a_T >_s \left\langle \frac{\Xi^{eq} - \Xi^{spk}}{\Xi^{eq} - 1} \right\rangle_s \Xi^{spk} \tag{4.3}$$

$< Q >_s$ is the flame surface-averaged value of the quantity Q as defined in [159], $< a_T >_s$ is the SGS strain rate and Ξ^{eq} is the wrinkling factor of a steady turbulent flame evaluated thanks to the KPP theory. It should be recalled that the resolved flame front is in fact a filtered one. $\Xi^{res}(t)$ models the wrinkling of the filtered growing burned gases volume. It is expressed as :

$$\Xi^{res}(t) = \frac{1}{2}\left(\frac{S_f(t)}{S_{mean}(t)} - 1\right)\left(1 - tanh\left(\frac{r_b(t) - \delta_{ign}/2}{k\delta_{ign}}\right)\right) \tag{4.4}$$

$S_f(t)$ is the surface of the filtered flame front. During the phase of growth, it is evaluated as $S_f(t) = \int_S \bar{\mathbf{n}}dS$. Then, the first factor appearing in Eq. (4.4) takes the form of the wrinkling affecting the filtered flame surface. This budget is damped at the first instants of growth of the burned gases kernel, because the filtered flame front should not undergo any wrinkling, the real kernel having a characteristic size too small to be wrinkled by turbulence. Practically, this is achieved in Eq. (4.4) by comparing the radius of the kernel $r_b(t)$ and the filter length scale δ_{ign} in a *tanh* function. The total flame surface being determined, the filtered flame surface density $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}(\underline{x},t)$ is distributed over the mesh according to a Bi-Modal-Limit expression in LES context [11] :

$$\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}(\underline{x},t) = \alpha\tilde{c}(\underline{x},t)(1 - \tilde{c}(\underline{x},t)) \tag{4.5}$$

The closure of α is carried out by writing that the volume integral $\int_V \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}(\underline{x},t)dV$ equates the total flame surface $S_{tot}(t)$. The reaction rate of progress variable may then be evaluated. Finally, when AKTIM-LES is coupled to ECFM-LES, the ignition model is unplugged as soon as the progress variable at the center of the burned gases volume reaches a value $\widetilde{c}^F$ close to unity, corresponding to a quasi-established flame front. The flame surface density is no more obtained by Eq. (4.5), but using the transport equation of ECFM-LES.

4.2.2 Coupling procedure for PCM-CFM I and II

The PCM-CFM I closure discussed in part 1 is associated to the following expression for the chemical species reaction rate [88] :

$$\bar{\rho}\widetilde{\omega}_{Y_i}(\underline{x},t) = \rho^u(\underline{x},t)S_L\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}(\underline{x},t)\left(Y_i^{eq}(\underline{x},t) - Y_i^u(\underline{x},t)\right) \tag{4.6}$$

where Y_i^{eq}, the equilibrium mass fraction of the i-th species, is taken from a CHEMKIN [78] computation. The coupling with the spark model is then achieved through the flame

surface density $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ field provided by AKTIM-LES. With PCM-CFM II of part 1 [88], the reaction rates of the chemical species are cast in :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) = \bar{\rho}\frac{\widetilde{Y}_i^{PCM-FPI}(\tilde{c}(\underline{x},t) + \gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t), S_c) - \widetilde{Y}_i(\underline{x},t)}{\gamma\delta_t} \tag{4.7}$$

The progress variable reaction rate $\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t)$ and unmixedness factor S_c are needed in this last expression. AKTIM-LES supplies the progress variable reaction rate for the transient phase of the flame kernel evolution following :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c = \rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}} \tag{4.8}$$

The unmixedness factor S_c is deduced from the relation between the SGS scalar variance and flame surface density (Eq. (41) in [88]) :

$$S_c = 1 - \frac{\overline{\Sigma}}{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})}\int_{0^+}^{1^-}\frac{\rho(c^*)c^*(1-c^*)}{|\nabla c^*|^{FPI}}dc^* = 1 - \frac{\overline{\Sigma}d^*}{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})} \tag{4.9}$$

At the end of the growth phase of the burned gases kernel, the PCM-CFM II relations [88] are used.

4.2.3 Modeling ignition with PCM-FPI

In the AKTIM-LES models, the burned gases pocket growths until a critical value $\widetilde{c}^F$ of the progress variable is reached, at which it is assumed that the flame is sufficiently developed so that the turbulent combustion closure can takeover to model the continuing flame expansion. For PCM-CFM I and II, this value is set to 1-ϵ, with $\epsilon = 10^{-2}$, because like ECFM-LES these coupled models require a quasi-established flame front. Nevertheless, PCM-FPI does not integrate the hypothesis of an established coherent flame front and the critical values $\widetilde{c}^F$ may be lower than 1-ϵ. It is then chosen to test two values : $\widetilde{c}^F = 0.05$, corresponding to a very small kernel of burned gases, to evaluate the ability of PCM-FPI to make it grow ; and $\widetilde{c}^F = 0.99$, to have the same coupling as the one chosen for PCM-CFM I and II. Furthermore, at this transition stage between the very starting of combustion and the established propagating flame, S_c must be chosen to guarantee continuity between the flame parameters given by AKTIM-LES and PCM-FPI. As discussed in [88], a S_c value exists so that for a given $\tilde{c}^*$ in a turbulent flame front, the flamelet-based reaction rate $\rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}(\tilde{c}^*)$ matches $\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c(\tilde{c}^*, S_c^*)$ given by the presumed β-pdf. To this end, an interpolation is carried out at the transition time in the PCM-FPI look-up table, to determine the proper S_c. Nevertheless, this method cannot be fully exact as $\rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}}(\tilde{c}^*)$ may be higher than the progress variable reaction rates stored in the PCM-FPI look-up table. When this occurs, the highest reachable reaction rate value is selected, as given for $S_c^* = 0$, and it is checked that both reaction rates are of the same order of magnitude. Furthermore, for progress variables lower than $\tilde{c}^* = 0.5$, two values of unmixedness factors S_c^* may be found. According to the thin reaction zone assumption used in AKTIM-LES, the highest values of S_c must be selected to get as close as possible to the bi-modal pdf limit associated to thin reaction zones. Other options may be possible, thus modifying the physical values at transition ; tests have shown that this does not have a profound impact on the global flame growth. This transition modeling may also be avoided, using a spark energy source term instead of an *a priori* kernel and selecting the progress variable level through the temperature reached after the sparking phase [144].

4.3 Canonical test cases

4.3.1 Principle and objectives

Model problems featuring forced ignition in a stoichiometric CH_4/air fresh mixture are first considered. These preliminary tests are along the line of the mono-dimensional simulations performed in the first part of this paper : no resolved motions are initialized and a frozen turbulence is imposed at the SGS scale. Spark-ignition is simulated using AKTIM-LES and the flame growth is then described by PCM-CFM or PCM-FPI models. As in the 1D simulations presented in [88], SGS turbulent scales Δ and velocity fluctuations u' are imposed to compute the FSD equation sources terms and the SGS turbulent viscosity used in the different combustion models ($\nu_T = Cu'\Delta$, with $C = 0.12$). Δ is taken equal to the grid size Δ_x for PCM-FPI and to the LES combustion filter size, $\widehat{\Delta} \approx 5\Delta_x$, for PCM-CFM, as it is the case in real LES. These simulations should be seen as *a priori* tests allowing to study the models SGS behavior in fixed SGS flow conditions, all things being otherwise fixed. The medium being initially quiescent, the flame remains spherical and the resolved wrinkling equals permanently unity. Consequently, the feedback of the resolved flame dynamics on SGS closures is not taken into account and discrepancies between the models may be maximized. The first objective of these simulations is to check the ability of the models to describe the development of a flame kernel after sparking : the flame should expand at a velocity higher than $(1+\tau)S_L$, $(1+\tau)$ being the thermal expansion rate across the flame front, and the propagation velocity should increase with the SGS turbulence level. This study also aims at evaluating different coupling approaches, between PCM-FPI and AKTIM-LES, on a simple configuration to highlight the optimal solution for SGS modeling, in the absence of any resolved scale.

4.3.2 Numerical setup

In these preliminary tests, only the mean flame front evolution is followed and the symmetric character of the problem allows for considering one eighth of the mean spherical flame kernel, thus including mean curvature effects. An eight cubic centimeter domain is simulated with a mesh spacing of 0.5 mm, a standard value for current LES of industrial configurations. Computations are performed for several SGS velocity fluctuations going from quasi-laminar conditions ($u' = 0.1\ m.s^{-1}$, $\nu_T/\nu = 0.4$) to high SGS turbulence levels ($u' = 5\ m.s^{-1}$, $\nu_T/\nu = 20$). These variations are representative of those encountered in real LES of propulsion systems, where the SGS turbulent intensity can, in some cases, vary a lot at the spark plug, from one cycle to another in piston engines or with time in aircraft gas turbines. Several aspects of the modeling are investigated during the monitoring of the flame growth rate. The PCM-FPI response in terms of transition to full burning after spark ignition and how it couples efficiently with the AKTIM-LES procedure is the first open question. The basic ability of the closure to develop a small pocket of burned gases is first estimated, selecting cases with only a small contribution of the separated spark treatment (*i.e.* $\widetilde{c}^F = 0.05$). Complementary test cases are considered, where the transition to full burning occurs at $\widetilde{c}^F = 0.99$, hence for an already established flame. This second option is known as the best one for FSD based models [134] and is then retained for PCM-CFM simulations. Considering PCM-FPI, two scalar dissipation

rates expressions are tested for micro-mixing modeling, the usual linear relaxation [43] (Table 4.1) and an hybrid expression adding a Bi-Modal-Limit (BML) contribution [42]. These different options lead to six model variations which are summarized in Table 4.1.

TAB. 4.1 – Summary of the models. $\tau_T = \Delta^2/(C_D \nu_T)$.

Model	Transition AKTIM-PCM	SGS scalar dissip. rate $s_{\chi_{Y_c}}$ closure
PCM-FPI 1	$\widetilde{c}^F$=0.05/0.99	$\bar{\rho} Y_{cv}/\tau_T$
PCM-FPI 2	$\widetilde{c}^F$=0.05/0.99	$(1-S_c)\bar{\rho} Y_{cv}/\tau_T$ $+S_c\bar{\rho}(-D\left\lvert\nabla \tilde{Y}_c\right\rvert^2 + \widetilde{\dot{\omega}_{Y_c} Y_c} - \widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c} Y_c^{eq}/2)$
PCM-CFM I	$\widetilde{c}^F$=0.99	-
PCM-CFM II	$\widetilde{c}^F$=0.99	-

4.3.3 Results

The time evolution of the radius $r_b(t)$ of the burned gases pocket is monitored during the simulation and plotted in Fig. 4.1, 4.2 and 4.3. For the sake of clarity, simulation results being the same for the two PCM-CFM models (not shown), only those related to PCM-CFM I are presented. Figs. 4.1 and 4.2 first suggest that the modeling of the scalar dissipation rate of PCM-FPI has more impact on the flame dynamics than the criterion $\widetilde{c}^F$ used to decide on the transition point between ignition modeling and flame propagation. Indeed, the asymptotic behavior of the models does not depend on the transition timing, the flame radius evolution being simply shifted in time. However the late transition ($\widetilde{c}^F = 0.99$) is here preferred to perform comparisons with PCM-CFM I. Using this criterion, it is observed (Fig. 4.3) that for all SGS flow conditions, the transitions from AKTIM-LES to PCM-CFM and PCM-FPI models lead to a propagation of the flame, whose velocity correctly increases with the SGS turbulence level. Nevertheless, the almost laminar flame ($u' = 0.1\ m.s^{-1}$) can not be reproduced with β-pdf based models without increasing the mesh resolution to capture the δ-function asymptotic pdf behavior, and ensuring appropriate proper SGS variance levels [155]. Whatever the scalar dissipation rate expression, with the present approach and spark-flame coupling procedure, the flame growth is lower than the theoretical one, contrary to PCM-CFM I, which well matches the

expected laminar evolution. This result may be analyzed looking at the surface-averaged unmixedness factor defined as :

$$< S_c >_s = \frac{\int_V S_c \overline{\Sigma}_{\tilde{c}} dV}{\int_V \overline{\Sigma}_{\tilde{c}} dV} \tag{4.10}$$

where the local flame surface density is estimated from the relation $\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x}, t) = \rho^u S_L \overline{\Sigma}(\underline{x}, t)$. S_c indeed directly impacts the reaction rate in the PCM-FPI table and leads to very low values for high segregation levels. $< S_c >_s$ being here close to unity (Fig. 4.4), the total reaction rate is very small, then slowing down the flame kernel expansion. However, increasing the turbulence level ($u' = 5\ m.s^{-1}$) provides cases for which the β-pdf is more likely to be successful compared to PCM-CFM, especially when using the BML formulation of the scalar dissipation rate (Fig. 4.3). In these conditions, $< S_c >_s$ reaches lower levels (Fig. 4.4). This is all the more true for PCM-FPI 1, which then predicts higher burning velocities than PCM-FPI 2 and PCM-CFM I. In these conditions, the flame radius evolution is not linear, confirming the ability of PCM-FPI, as PCM-CFM, to account for some history effects, with a description of the SGS burning velocity (related to the SGS flame wrinkling) progressive increase, even in fixed SGS flow conditions. All these results confirm those of the 1D simulations presented in [88], indicating a functioning zone of PCM-FPI models for a given mesh in terms of SGS turbulent intensity, while PCM-CFM approaches always show a correct behavior.

4.4 Simulation of a laboratory spark-ignited experiment

4.4.1 Experimental configuration

A spark-ignited experimental setup [131] is simulated in which a given fuel/air mixture crosses a vertical tunnel to enter a square and transparent combustion chamber of 80 mm wide. The created burned gases kernel expands while convected at a mean velocity of 4 $m.s^{-1}$. The flame surface evolution was studied using high-speed laser tomography, a detailed sketch of the experimental facility is given in [131]. Measurements were conducted for various turbulence grids (ratio between the velocity fluctuation and mean flow velocity of $R^{\%U} = 4$ %, 9 % and 12.5 %) and for several fuels (H_2, CH_4, C_3H_8) to discuss Lewis number influence. In the present study only methane is considered, with equivalence ratios ϕ varying from 0.7 to 1.1.

4.4.2 Numerical setup

A temporal-type simulation is performed, the computational domain is thus a cube assumed to be convected at 4 $m.s^{-1}$. The grid is 40 mm wide with hexahedrons of 0.5 mm characteristic length, non-reflective boundary conditions are prescribed at all boundaries. A Passot-Pouquet spectrum [116] is used to generate a synthetic homogeneous three-dimensional turbulence, a choice that was previously discussed in [134] for simulating the same experiment with propane. Spark-ignition is simulated using AKTIM-LES and the transition criteria is chosen as $\widetilde{c}^F = 0.99$ to allow comparisons between FSD and β-pdf

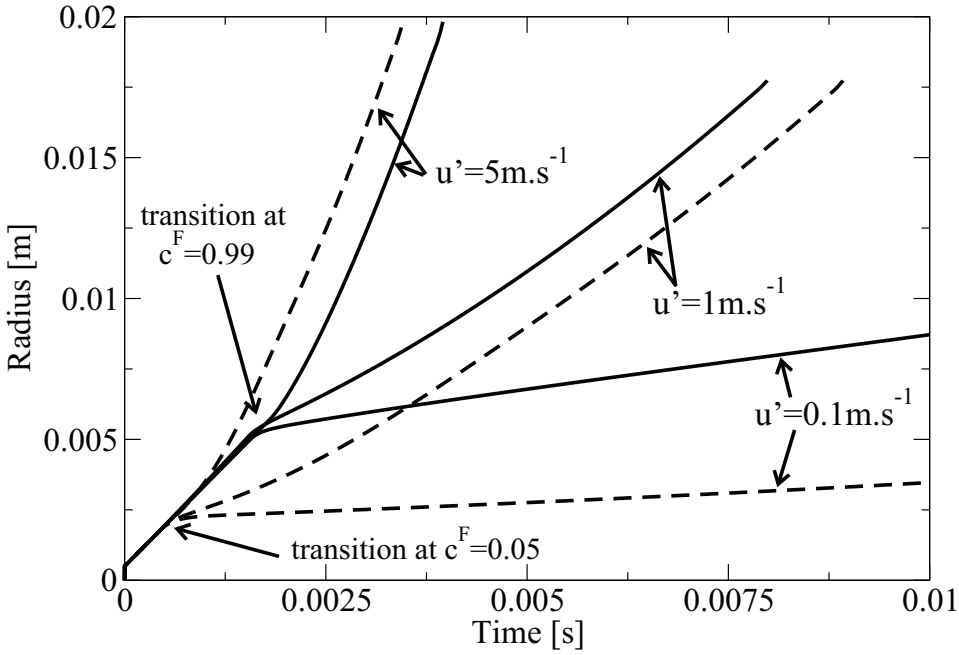


FIG. 4.1 – Evolution of the mean flame radius r_b for several SGS turbulence levels and transition criteria $\widetilde{c}^F$ using PCM-FPI with a linear relaxation closure of the scalar dissipation rate (Eq. (30) in [42]).

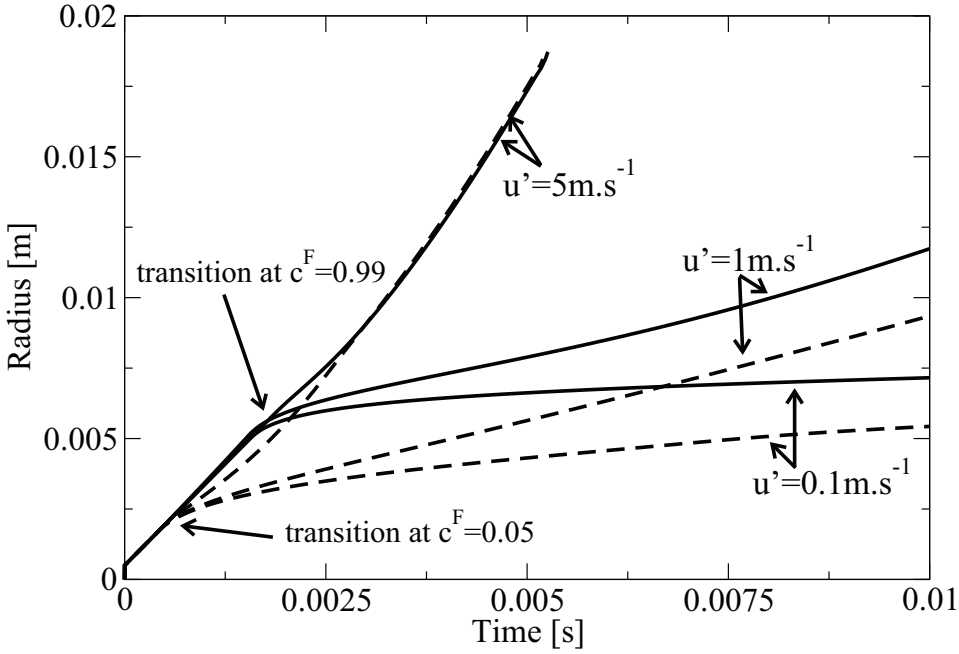


FIG. 4.2 – Evolution of the mean flame radius r_b for several SGS turbulence levels and transition criteria $\widetilde{c}^F$ using PCM-FPI with an hybrid BML closure of the scalar dissipation rate (Eq. (33) in [42]).

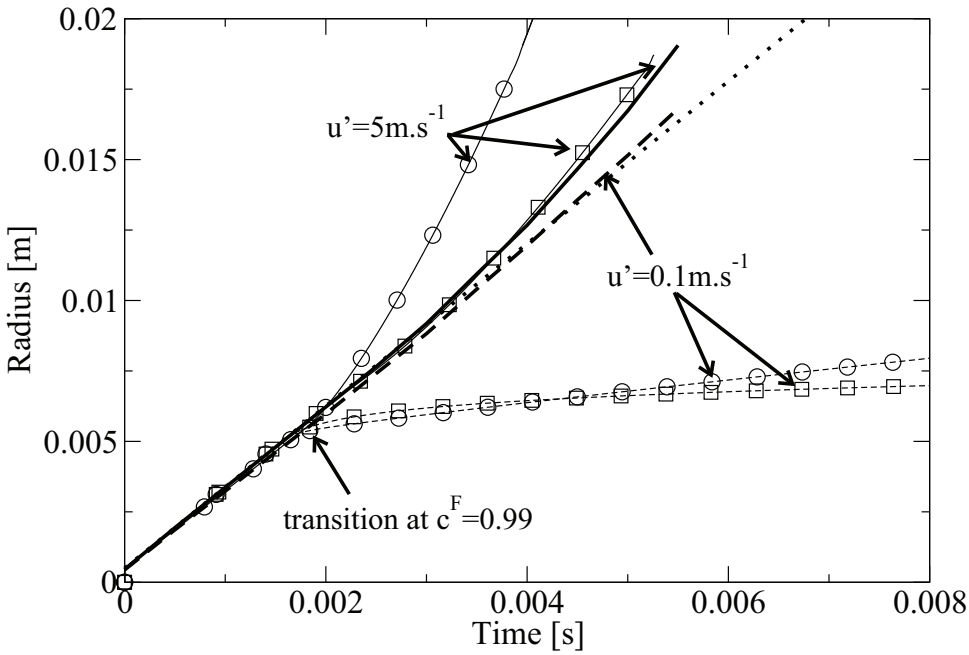


FIG. 4.3 – Evolution of the mean flame radius r_b for several SGS turbulence levels : comparison between PCM-CFM I (bold line without symbols), PCM-FPI 1 (circles) and PCM-FPI 2 (squares). The dotted line corresponds to the theoretical laminar evolution : $dr_b/dt = (1+\tau)S_L$.

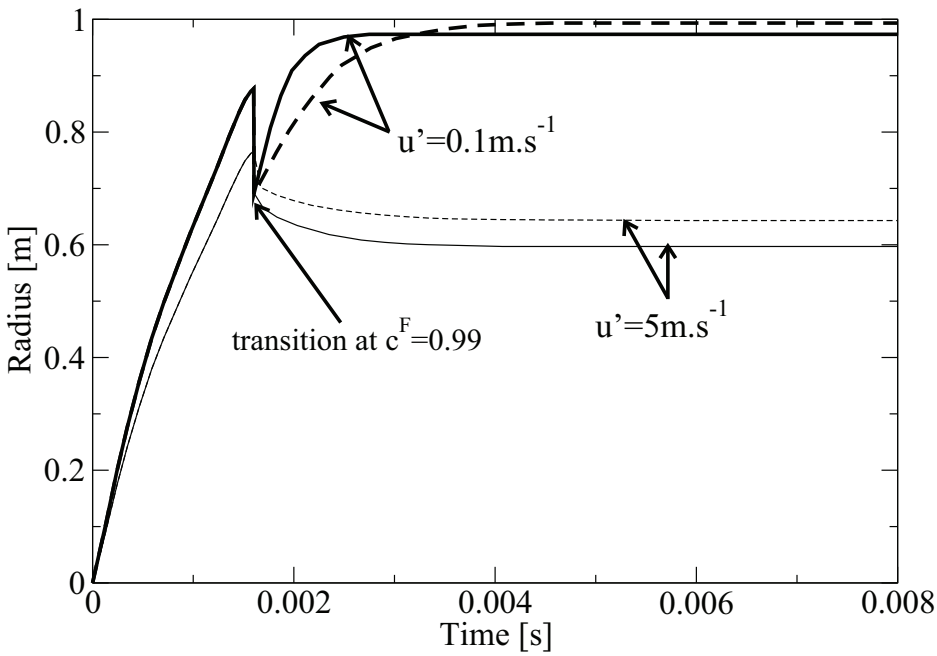
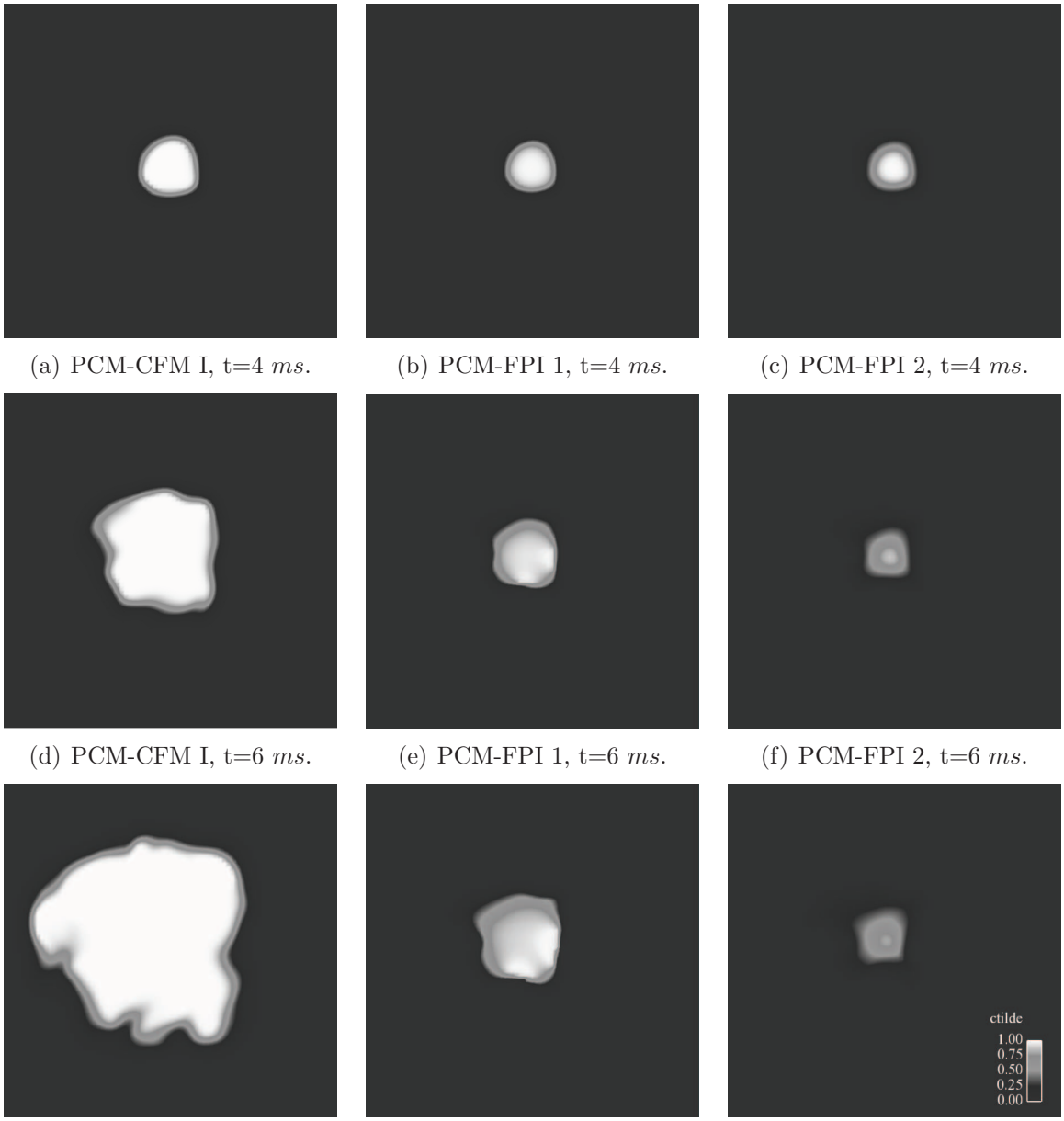


FIG. 4.4 – Surface-averaged unmixedness factor evolution. Line : PCM-FPI 1 , dashed line : PCM-FPI 2.

based models. Experimentally, two radii are defined in the plane of measurement for the quantification of the flame propagation. The first one, called the mean radius R_s, corresponds to the radius of a cylindrical flame having the same surface as the real one in the experimental cut-plane. A total radius R_p is also defined and corresponds to a cylindrical flame having the same perimeter as the real one in the measurement plane. R_p can be seen as an image of the turbulent flame surface, while R_s is more related to the mean flame surface.

4.4.3 Results

Simulations are first performed for $\phi = 1.0$, leading to strongly different behaviors of the models : PCM-FPI approaches do not lead to a flame propagation after spark-ignition, contrary to PCM-CFM I and II (Fig. 4.5), higher mesh resolution would be needed to capture the flame. This is because the SGS velocity fluctuations are very low ($u'_{SGS} \approx 0.14\ m.s^{-1}$ for $R^{\%U} = 9\%$). As explained in the previous canonical tests, in this case, the unmixedness factor is close to unity (Fig. 4.6), then leading to very low values of the reaction rate. PCM-FPI models then appear not adapted to simulate this configuration, at least with the current mesh resolution. Considering PCM-CFM, in order to perform comparisons with experimental results, the mean and total radii are retrieved from the simulations following : $R_s = (3V_b/4\pi)^{\frac{1}{3}}$ and $R_p = \left(\int_V \bar{\Sigma}_{\tilde{c}} dV/4\pi\right)^{\frac{1}{2}}$. Very similar results are then obtained between the two hybrid models, with a very good agreement compared to experimental data for all equivalence ratios (Fig. 4.7) and turbulence levels (Fig. 4.8). The fact that the evolution of R_s and R_p are both well predicted indicate that the flame wrinkling growth from the laminar kernel to the fully turbulent flame is correctly described in all conditions. It is also possible to access the total flame surface $S_{tot}(t)$ and its resolved part $S_{res}(t)$, to determine the resolution level of the flame front. The resolved flame surface is known from : $S_{res}(t) = \int_V |\nabla \bar{c}| dV$, while the total one is computed following : $S_{tot}(t) = \int_V \overline{\Sigma}(\underline{x}, t) dV$, where $\overline{\Sigma}$ is directly deduced from the transported flame surface density $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$ (see [88]). Figure 4.9 clearly shows that for the hybrid models, the major part of the flame surface is resolved by the current mesh. Consequently, this configuration is close to those which can be encountered in spark-ignition engines at low load : the turbulence at the spark plug can indeed be very low for a given engine cycle due to cyclic variations of the flow. However, in many industrial applications, the turbulence level at the spark plug is generally high. This configuration may then not be appropriate to fully validate the SGS behavior of the models. For this reason, a synthetic calculation is proposed in what follows to further assess the model robustness and to evaluate the PCM-FPI response in highly turbulent conditions.

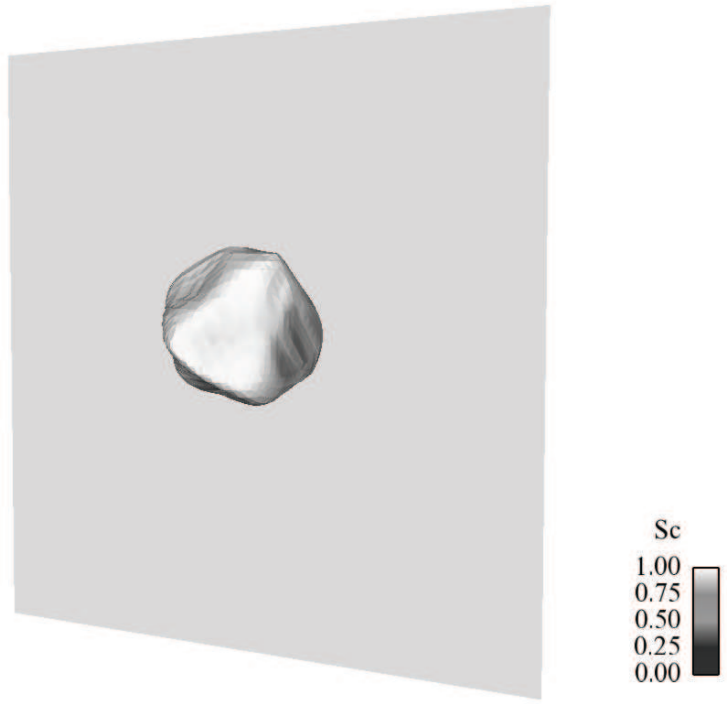


(a) PCM-CFM I, t=4 ms. (b) PCM-FPI 1, t=4 ms. (c) PCM-FPI 2, t=4 ms.

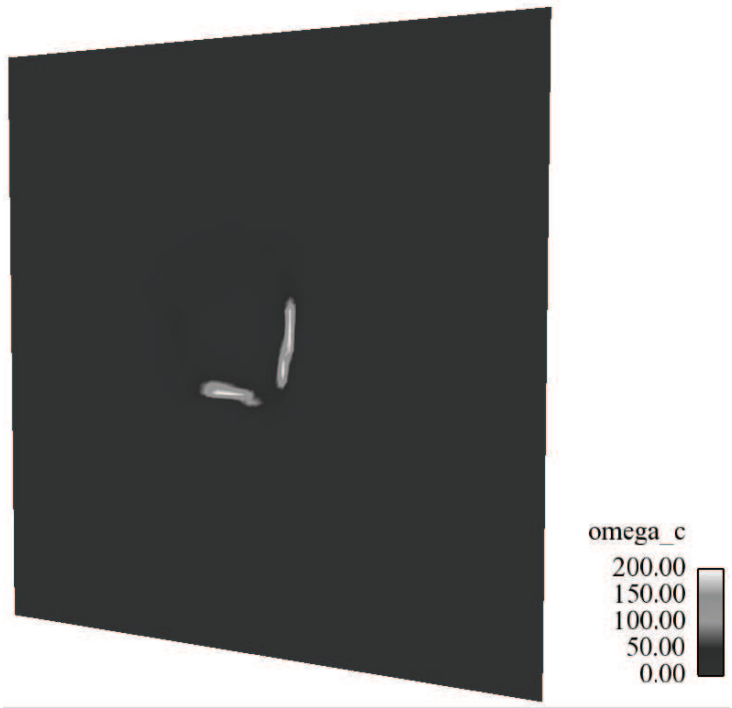
(d) PCM-CFM I, t=6 ms. (e) PCM-FPI 1, t=6 ms. (f) PCM-FPI 2, t=6 ms.

(g) PCM-CFM I, t=8 ms. (h) PCM-FPI 1, t=8 ms. (i) PCM-FPI 2, t=8 ms.

Fig. 4.5 – Unsteady evolution of the progress variable field for PCM-CFM I, PCM-FPI 1 and PCM-FPI. Experimental case $R^{\%U} = 9\%$ [131].

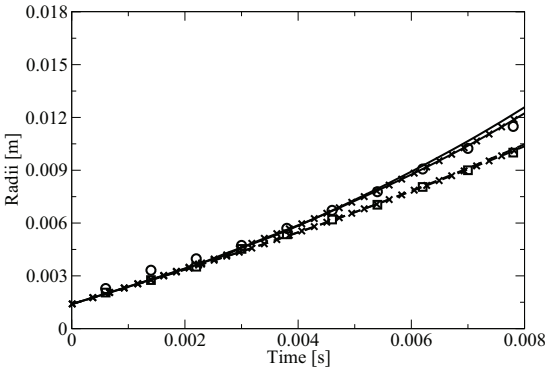


(a)

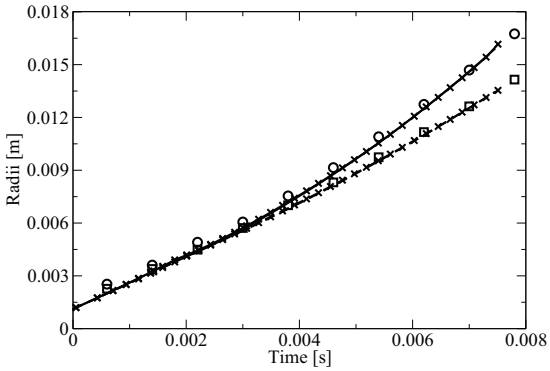


(b)

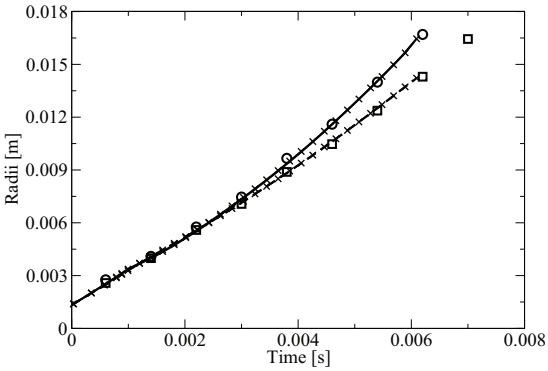
FIG. 4.6 – (a) : Iso-$\widetilde{c} = 0.5$ surface colored by the unmixedness factor of the progress variable. (b) : Filtered source term $\overline{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c$ (kg·m^{-3}·s^{-1}) in the plane $z = 0$. At t ≈ 8 ms with PCM-FPI 1 (Turbulence intensity $R^{\%U} = 9\%$).



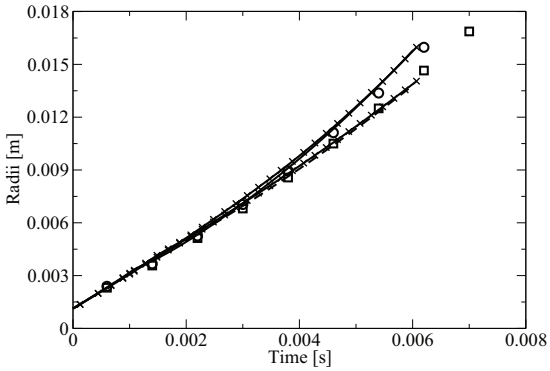
(a) ϕ=0.7.



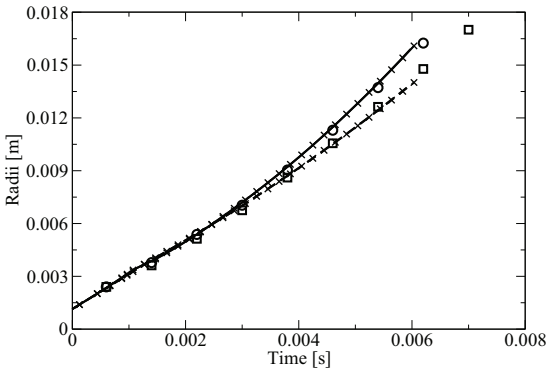
(b) ϕ=0.8.



(c) ϕ=0.9.

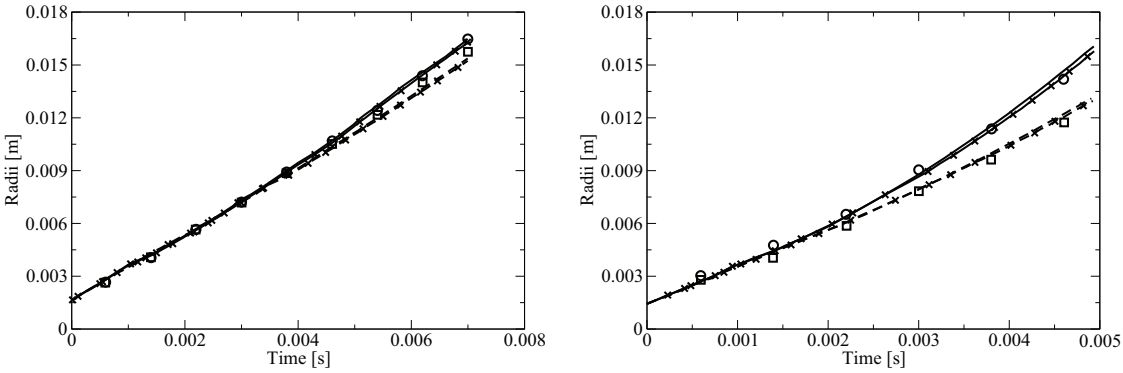


(d) ϕ=1.0.



(e) ϕ=1.1.

FIG. 4.7 – Evolution of the characteristic flame radii *vs* time for experimental case $R^{\%U} = 9\%$ [131]. Mean radius R_s - squares : experiments ; dash-line : PCM-CFM I ; dash-line with crosses : PCM-CFM II. Total radius R_p - circles : experiments ; line : PCM-CFM I ; line with crosses : PCM-CFM II.



(a) $R^{\%U} = 4\%$. (b) $R^{\%U} = 12.5\%$.

FIG. 4.8 – Evolution of the characteristic flame radii vs time for an equivalence ratio of 1.0. Mean radius R_s - squares : experiments [131] ; dash-line : PCM-CFM I ; dash-line with crosses : PCM-CFM II. Total radius R_p - circles : experiments ; line : PCM-CFM I ; line with crosses : PCM-CFM II.

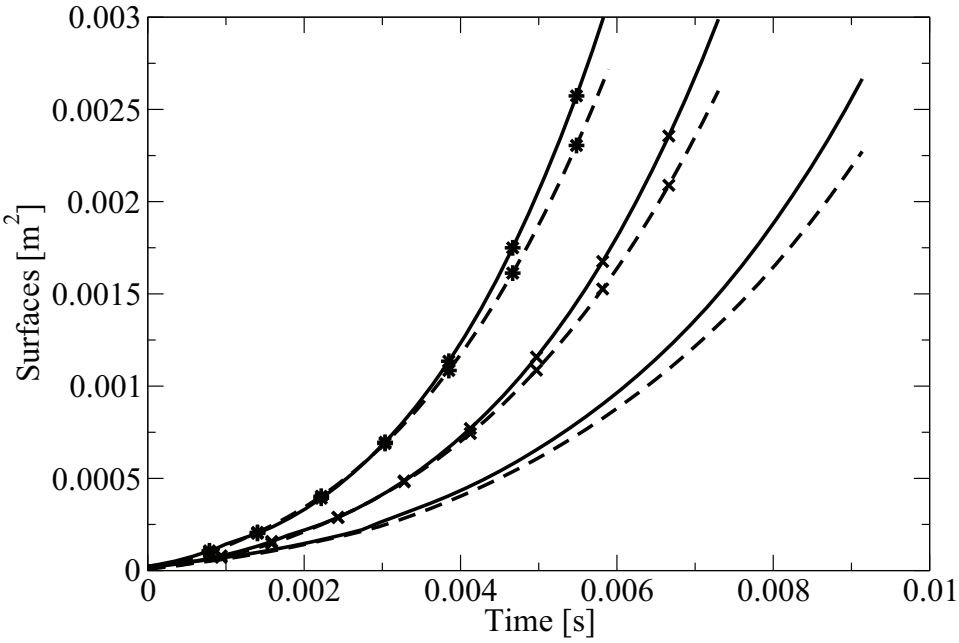


FIG. 4.9 – Evolutions with time of the total (full line) and resolved (dash-line) flame surfaces with PCM-CFM II for the experimental case $R^{\%U} = 9\%$ [131]. No symbols : $\phi = 0.7$. Crosses : $\phi = 0.8$. Stars : $\phi = 0.9$.

4.5 Flame kernel development in highly turbulent flows

4.5.1 Definition of the numerical configuration

The synthetic configuration chosen in this section is based on flow characteristics obtained in automotive spark-ignition engines at high load. In this case, the turbulent intensity is high and cycle-to-cycle variations are very low. A spark advance of 30 crank angle degree is considered, leading to a piston-cylinder head distance of about 15-20 mm, which corresponds to the largest size of vortex that can be found in the combustion chamber. A value of about 10 mm then seems to be a reasonable estimation of the integral length scale at ignition timing. According to the literature [91], close to the top dead center in a spark-ignition engine, a speed of 2000 rev/min approximatively corresponds to a velocity fluctuation of 3 $m.s^{-1}$. Theses two values (10 mm and 3 $m.s^{-1}$) are therefore retained for the following study. The mesh is still cubic, 120 mm wide and the cells length scale is 1 mm. The boundary conditions and the initiation of the flow correspond to the procedure used in the previous section. PCM-CFM II always provides results very close to PCM-CFM I, and only this last model is used in what follows.

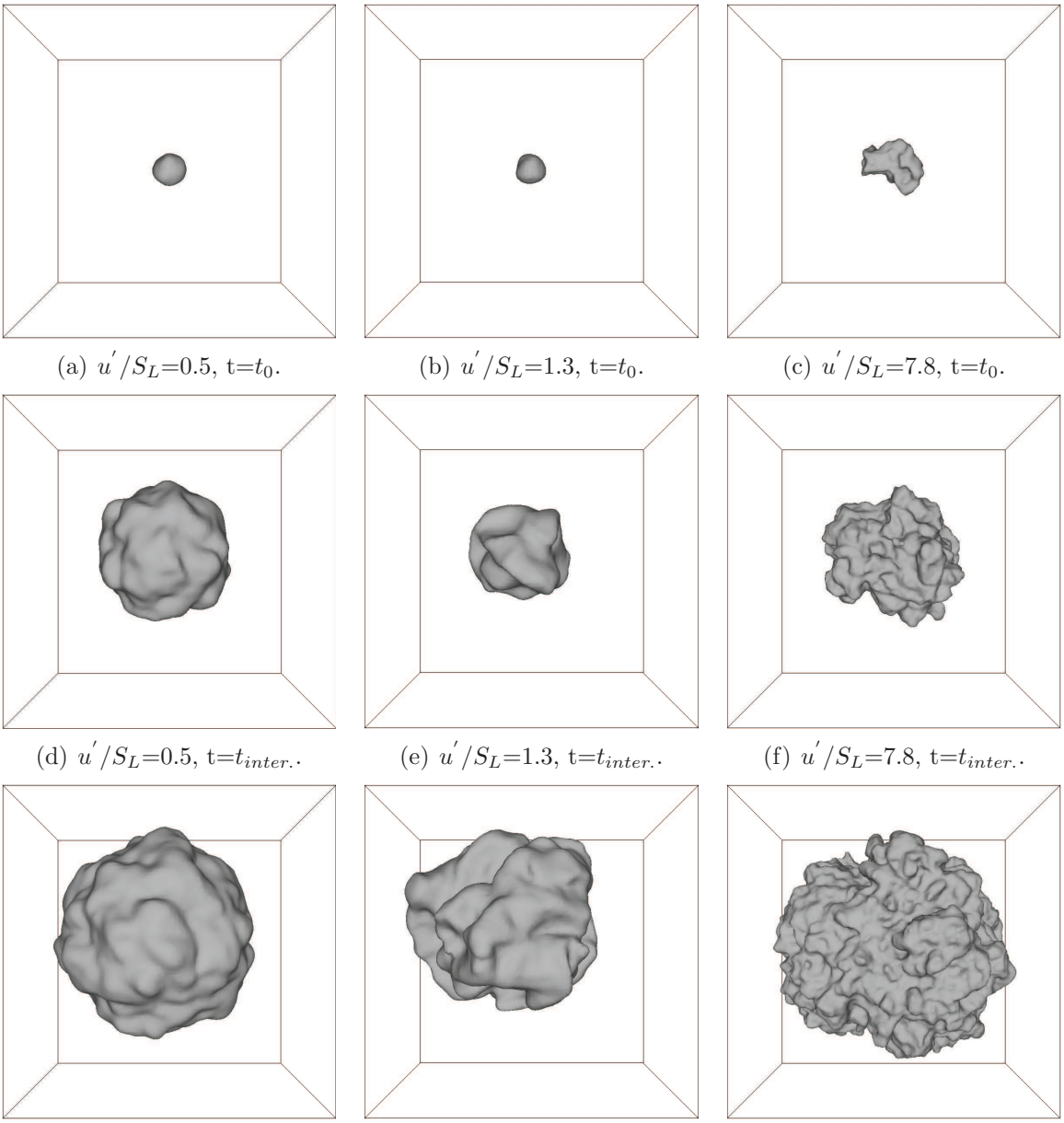
4.5.2 Simulation results

At first, Fig. 4.10 summarizes qualitatively the results of PCM-CFM I for the ratios $u^{'}/S_L$ considered until now by representing the iso-surfaces $\tilde{c} = 0.5$ for several characteristic times. The increase of the resolved wrinkling with turbulence is easily noticeable. PCM-CFM I being validated against experiment [131] in above section, it is used now as a reference model for comparison with PCM-FPI. Figure 4.11 depicts the unsteady evolution of the progress variable field for PCM-CFM I, PCM-FPI 1 and PCM-FPI 2 [88]. During the early growth phase, the kernel of burned gases is highly distorted underlining the importance of integrating a resolved wrinkling effect $\Xi^{res}(t)$ in the spark-ignition model (Eq. (4.4)). After the transition from AKTIM-LES to the combustion model, local reaction rates remain still lower for PCM-FPI models, but flame propagation is observed with PCM-FPI 2, which gives results quite close to PCM-CFM I and seems to be more adequate than PCM-FPI 1 to treat this configuration. PCM-FPI 2 may then be compared with PCM-CFM I quantitatively from the evaluation of three characteristic wrinklings : (1) the total wrinkling undergone by the flame : $\Xi^{tot}(t) = S_{tot}(t)/S_{mean}(t)$; (2) the resolved contribution : $\Xi^{res}(t) = S_{res}(t)/S_{mean}(t)$; (3) the contribution contained within the filter length scale : $\Xi^{sgs}(t) = S_{tot}(t)/S_{res}(t)$. For PCM-FPI 2, the FSD used to compute the total flame surface is written as : $\overline{\Sigma} = \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c/\rho^u S_L$ for PCM-FPI 2, while S_{mean} and S_{res} are computed as discussed above. The proposed quantities are plotted in Figs. 4.12, along with the surface-averaged equilibrium wrinkling factor $< \Xi^{eq} > (t)$ of PCM-CFM I. This closure predicts a total wrinkling factor greater than the one of PCM-FPI 2, which corresponds to a faster propagation, as illustrated in Fig. 4.11. As explained previously, this quantity is decomposed in : $\Xi^{tot}(t) = \Xi^{res}(t)\Xi^{sgs}(t)$. The two models give the same evolution of the resolved contribution with time, which is correlated to the behavior depicted in Fig. 4.11. The difference between the total wrinkling factors is thus clearly explained by the SGS contribution, which reaches a threshold at approximately 8.2 ms

and slightly decreases until the end of the computation for PCM-FPI 2, whereas the same quantity still increases for PCM-CFM I. This latter trend seems to be the most logical as the SGS wrinkling factor should grow towards its equilibrium value $\Xi^{eq}(t)$ which remains well higher than the predicted magnitudes of $\Xi^{sgs}(t)$ for PCM-CFM I and PCM-FPI 2. The temporal evolution of the surface-averaged unmixedness factor $< S_c >_s$ is finally plotted in Figs. 4.13, to supply a global understanding of the behavior of PCM-FPI 2. During the growth phase, when AKTIM-LES is used, the unmixedness factor stays above 0.8, which is coherent with an imposed flamelet-based reaction rate. When PCM-FPI 2 is used for the propagation modeling, the evolution of the SGS wrinkling factor $\Xi^{sgs}(t)$ is directly correlated to the one of $< S_c >_s$: between the transition time (t $\approx$ 7 ms) and t $\approx$ 8.2 ms, $\Xi^{sgs}(t)$ ($< S_c >_s$) increases (decreases) and slightly increases (decreases) again after this interval. Two interpretations could be provided for the behavior of PCM-FPI 2 : either the modeling of the unmixedness factor evolution does not enable to model the progressive wrinkling of the flame front by turbulence, *i.e.* an increasing wrinkling with time ; or PCM-FPI 2 has reached its own equilibrium wrinkling factor. The second hypothesis seems the most justified as canonical test cases revealed the integration of the history effect by PCM-FPI models.

4.6 Concluding remarks

In this paper, SGS modeling based on premixed flamelet and presumed pdf (PCM-CFM I and II and two versions of PCM-FPI discussed in [88]) are coupled with a model for spark ignition (AKTIM-LES). Several coupling methods were proposed, based on different choices for the transition timing between ignition modeling and flame propagation. Simulations of canonical ignition problem were conducted to highlight that, with AKTIM-LES, the final response of PCM-FPI was weakly dependent on the coupling parameters ; however, the unsteady behavior was deeply impacted by the choice of the SGS scalar dissipation rate. Furthermore, some of the history effects appeared to be indirectly taken into account in the PCM-FPI formalism. Nevertheless, this formalism could not correctly describe the flame kernel expansion for low SGS turbulence intensities, without increasing the mesh resolution to capture the asymptotic δ-function pdf behavior ; and the functioning zone already observed in [88], and also discussed in [155], was recovered. On the contrary, PCM-CFM results always led to a coherent evolution of the flame. For a more quantitative analysis, several operating points experimentally studied [131] with methane were modeled. A good agreement was obtained for PCM-CFM I and II when comparing the characteristic radii of the burned gases volume against experimental results for a wide range of conditions, both in terms of turbulence intensity and equivalence ratio. Nevertheless, concerning PCM-FPI, no quantitative comparison was possible as it seemed that the SGS turbulent intensity was too low, leading to very weak levels of reaction rates, still because of the lack of mesh resolution. In many applications, the SGS turbulence being higher than in this experimental configuration, a synthetic test case was then regarded to further assess the models behavior. This case was designed to be representative of what can be found in spark-ignition engines at high load, but is also a good image of conditions encountered in gas turbines. Whereas PCM-FPI 1, based on a classical linear-relaxation SGS scalar dissipation rate closure, still provided quite weak reaction rates, PCM-FPI 2, integrating the improved BML form gave a result qualitatively close to the one obtained

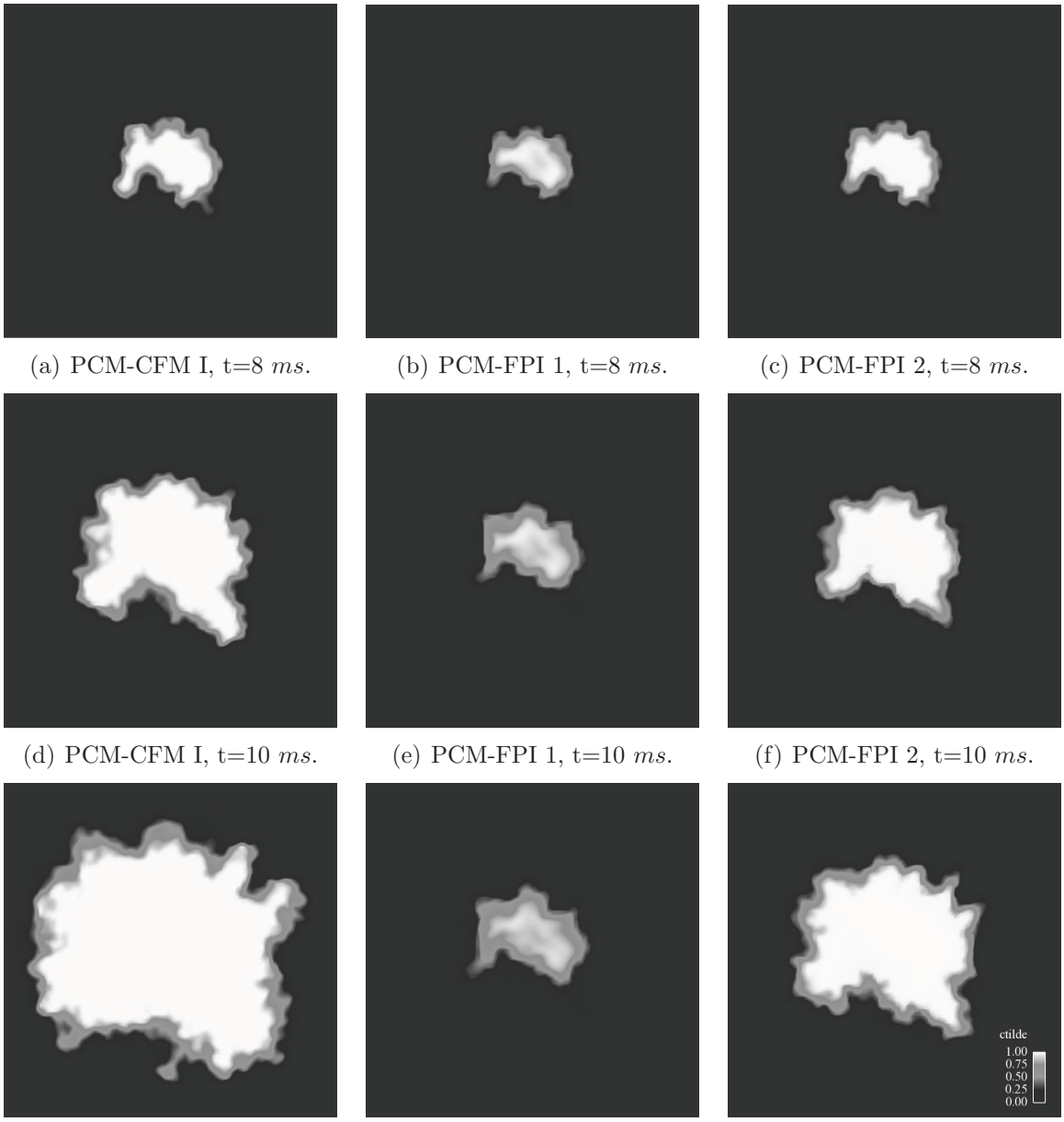


(a) $u^{'}/S_L$=0.5, t=t_0. (b) $u^{'}/S_L$=1.3, t=t_0. (c) $u^{'}/S_L$=7.8, t=t_0.

(d) $u^{'}/S_L$=0.5, t=$t_{inter.}$. (e) $u^{'}/S_L$=1.3, t=$t_{inter.}$. (f) $u^{'}/S_L$=7.8, t=$t_{inter.}$.

(g) $u^{'}/S_L$=0.5, t=t_{end}. (h) $u^{'}/S_L$=1.3, t=t_{end}. (i) $u^{'}/S_L$=7.8, t=t_{end}.

FIG. 4.10 – Unsteady evolution of the iso-surface $\tilde{c} = 0.5$ for several ratios $u^{'}/S_L$ obtained from a PCM-CFM I computation ($\Phi = 1.0$). t_0 corresponds to the transition time between AKTIM-LES and PCM-CFM I, t_{end} is the time corresponding to the end of the computation and $t_{inter.}$ is the average of these two times.



(a) PCM-CFM I, t=8 ms. (b) PCM-FPI 1, t=8 ms. (c) PCM-FPI 2, t=8 ms.

(d) PCM-CFM I, t=10 ms. (e) PCM-FPI 1, t=10 ms. (f) PCM-FPI 2, t=10 ms.

(g) PCM-CFM I. Time = 12 ms. (h) PCM-FPI 1, t=12 ms. (i) PCM-FPI 2, t=12 ms.

FIG. 4.11 – Unsteady evolution of the filtered progress variable field for the plane z=0 at t = 8 ms (just after the transition between AKTIM and the propagation model), t = 10 ms and t = 12 ms when modeling the spark-ignition engine like ignition.

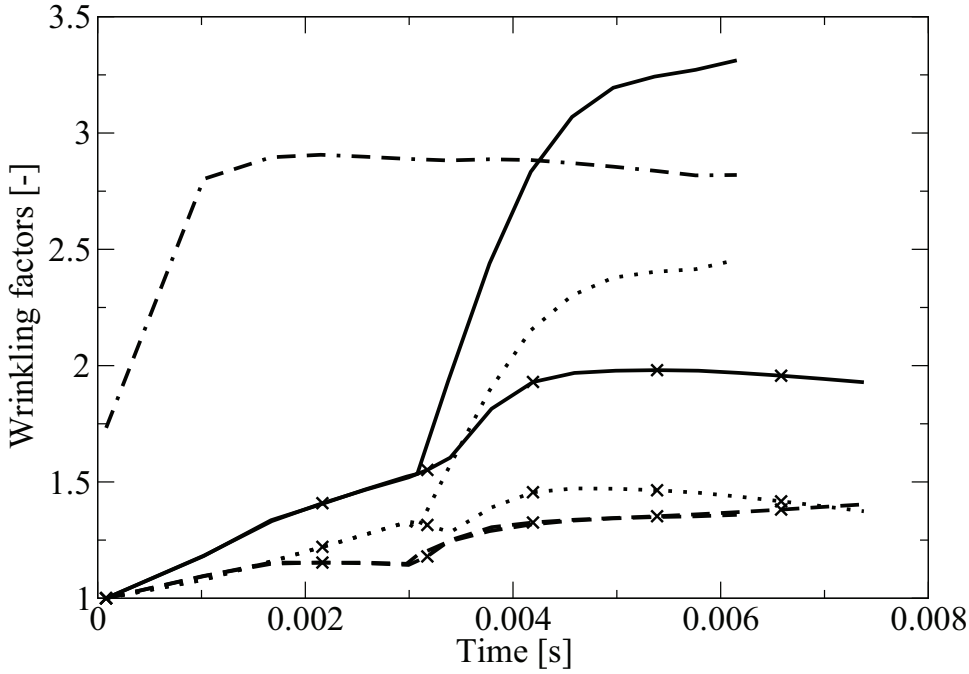


FIG. 4.12 – Characteristic wrinkling factors for the modeling of the spark-ignition engine like ignition at high load. Dotted-dashed line : Ξ^{eq} for PCM-CFM I. Total (full line), resolved (dash-line) and SGS (dots) wrinkling factors for PCM-CFM I (no symbols) and PCM-FPI 2 (crosses).

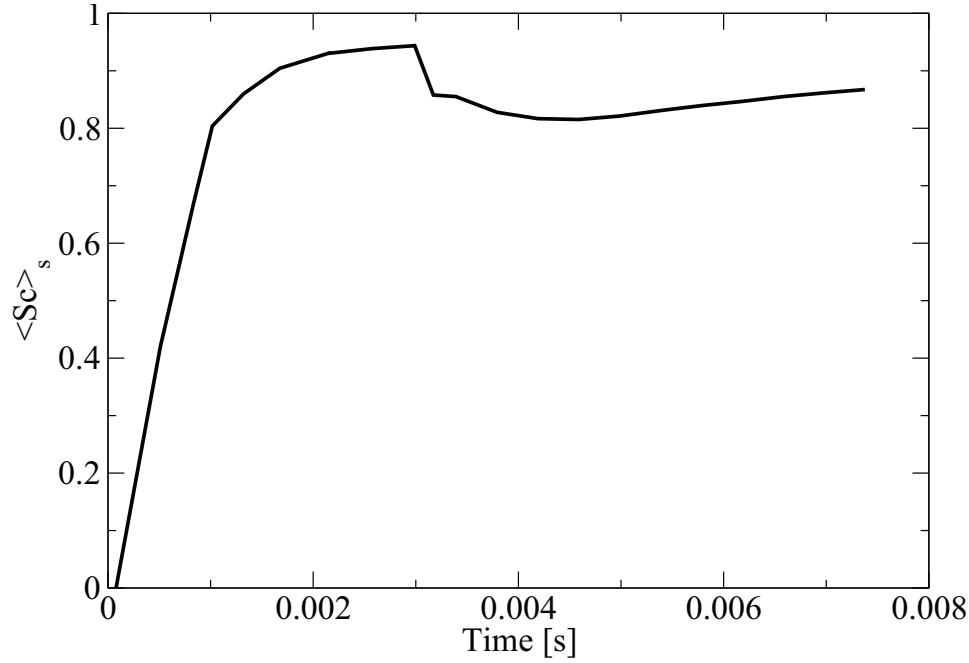


FIG. 4.13 – Evolution of the surface-averaged values of the unmixedness factor S_c with time for PCM-FPI 2.

by PCM-CFM I, here seen as the reference. When performing more advanced comparisons, the same quantity of wrinkling was found at the resolved level for both models, the flame propagating itself faster for PCM-CFM I due to larger SGS wrinkling factors. The unmixedness factor was shown to indirectly pilot the SGS wrinkling and then the history effect. Finally PCM-CFM I and II coupled with AKTIM-LES proved their ability to predict a proper unsteady evolution of the growth and propagation mechanisms.

4.7 Conclusion

Ce chapitre a montré une bonne prédiction par les modèles I et II de l'évolution du noyau de gaz brûlés aux premiers instants de son existence par rapport à l'expérience et un comportement qualitativement satisfaisant pour un maillage et des conditions de turbulence représentatives d'un calcul moteur.
D'autre part, quelques difficultés de mise en oeuvre de la modélisation PCM-FPI pour le cas moteur ont été mises en avant à savoir une dépendance de son fonctionnement au choix de la dissipation scalaire en avancement et la nécessité d'avoir, au niveau sous-maille, un niveau d'énergie turbulente suffisant pour permettre l'allumage.

Chapitre 5

Modélisations de transitions entre auto-inflammation et flamme de prémélange

Ce chapitre aborde les formalismes permettant une modélisation simultanée de l'auto-inflammation et de la propagation d'une flamme de prémélange en milieu homogène en se basant sur les modèles présentés auparavant. Les modèles alors obtenus présentent l'intérêt immédiat de décrire les auto-inflammations pouvant se produire dans un moteur à allumage commandé, comme le pré-allumage et le cliquetis et de fournir de premiers outils, dans le cadre de la LES, pour l'étude de ces phénomènes.
Les aspects théoriques permettant d'intégrer des modèles d'auto-inflammation aux modèles PCM-CFM I et II proposés aux chapitre 3 et 4 sont tout d'abord décrits. Des cas tests simples permettant d'illustrer la fonctionnalité des modélisations proposées sont ensuite détaillés et leurs résultats analysés.

5.1 Généralisation des modèles proposés

5.1.1 Modèle I

Pour le modèle PCM-CFM I, une pdf a permis de lier la densité de surface de flamme $\overline{\Sigma}$ et la prédiction des taux de réaction des espèces chimiques *via* l'équation (3.43).

Le taux de réaction prédit par la pdf bimodale serait alors :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) = \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(c^*)\widetilde{P}(c^*)dc^* = (1-\tilde{c})\dot{\omega}_{Y_i}(c^*=0) + \tilde{c}\dot{\omega}_{Y_i}(c^*=1) \tag{5.1}$$

Les taux de réaction $\dot{\omega}_{Y_i}(c^*=0)$ et $\dot{\omega}_{Y_i}(c^*=1)$ sont non nuls car ils correspondent respectivement à l'auto-inflammation des gaz frais et à l'éventuelle post-oxydation des gaz brûlés. Afin d'être cohérent par rapport à la modélisation adoptée pour la flamme de

prémélange, cette écriture est modifiée suivant :

$$\begin{aligned}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) &= \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(c^*)\widetilde{P}(c^*)dc^* \\ &= (1-\tilde{c})\dot{\omega}_{Y_i}(c^*=0) + \frac{\rho^u}{\bar{\rho}} S_L \overline{\Sigma}(\widetilde{Y}_i^{eq} - \widetilde{Y}_i^u|^u) + \tilde{c}\dot{\omega}_{Y_i}(c^*=1) \end{aligned} \tag{5.2}$$

En supposant dans un premier temps qu'il n'y a pas de réaction de post-oxydation en aval du front de flamme, le dernier terme peut être supprimé. Le taux de réaction principal $\rho^u S_L \overline{\Sigma}(Y_i^{eq} - Y_i^u|^u)$ consiste en un taux de conversion des espèces de leur état "gaz frais" vers leur état d'équilibre et assure une bonne prédiction de la vitesse de propagation du front de flamme turbulent. Pour le cas de l'auto-inflammation (AI), le même principe est adopté, c'est-à-dire que les gaz frais sont convertis en gaz brûlés suivant une cinétique spécifique, ce qui s'écrit :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{AI} = (1-\tilde{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI}(\tilde{Y}_i^{eq} - \tilde{Y}_i^u|^u) \tag{5.3}$$

Pour prédire précisément le délai de l'AI et les taux de réaction associés $\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI}$, le modèle TKI (*Tabulated Kinetics of Ignition*) proposé par Colin *et al.* [37] et actuellement exploité dans le modèle ECFM-3Z est repris. Ce modèle peut être perçu comme un modèle FPI simplifié dans le sens où seul le taux de réaction de la variable d'avancement est lu dans la table chimique, les taux de réaction des espèces chimiques étant déterminés à partir d'une chimie différente de FPI. Ce choix s'explique notamment par le fait que les variables d'avancement de TKI et de PCM-CFM I sont identiques et que seul manque le taux de réaction pour la variable d'avancement dans l'équation (5.3).

TKI intègre une équation de transport pour une espèce fictive, l'intermédiaire réactionnel $\widetilde{Y}_{IR}$. Cette fictive évolue de 0 au temps initial vers la valeur de $\widetilde{Z}$ lorsqu'un délai caractéristique de l'auto-inflammation τ_{AI} est atteint. Dans la formulation d'origine du modèle, ce temps était le délai de flamme froide τ_{LT}. Néanmoins, dans les tests réalisés par la suite, le temps caractéristique choisi est le temps mis pour atteindre un avancement c^* de 10^{-3}. L'équation de transport de $\widetilde{Y}_{IR}$ s'écrit simplement :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y}_{IR}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_{IR}) = \nabla \cdot (\bar{\rho}(D + D_T)\nabla \widetilde{Y}_{IR}) + \bar{\rho}\widetilde{Z}F(\tau_{AI}) \tag{5.4}$$

La fonction $F(\tau_{AI})$ permet de tenir compte de l'évolution non linéaire de la chimie de l'auto-inflammation [87] :

$$F(\tau_{AI}) = \frac{(\alpha^2\tau_{AI}^2 + 4(1-\alpha\tau_{AI})\widetilde{Y}_{IR}/\widetilde{Z})^{\frac{1}{2}}}{\tau_{AI}} \tag{5.5}$$

où α est un paramètre dont la valeur est fixée à 1 s^{-1}.

A l'instant τ_{AI}, le taux de réaction spécifique à l'auto-inflammation s'écrit :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI} = \bar{\rho}\frac{c^*}{\tau_c} \tag{5.6}$$

où τ_c est un paramètre de l'ordre de quelques pas de temps, qui permet de tendre rapidement vers l'avancement c^*. Ensuite, le taux de réaction de la variable d'avancement est interpolé dans la table jusqu'à la fin de la réaction d'auto-inflammation comme fonction de la température des gaz frais T^u, de la richesse locale ϕ et de la pression. Le principe du modèle est illustré par la figure 5.1.

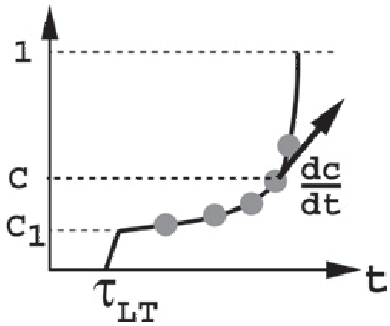


FIG. 5.1 – Principe du modèle TKI : une fois le délai de flamme froide noté ici τ_{LT} atteint, le dégagement de chaleur est interpolé dans une table. Issu de [37]

Le taux de réaction $\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI}$ est interpolé comme fonction de l'avancement lié à la progression du front de flamme vers les gaz frais :

$$\tilde{c} = 1 - \frac{\widetilde{Y}_F^u}{\widetilde{Z}} \tag{5.7}$$

où $\widetilde{Y}_F^u$ est la fraction massique de carburant non brûlé. Son équation de transport devient, avec l'intégration du taux de réaction en auto-inflammation :

$$\frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y}_F^u}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_F^u) = \nabla \cdot (\bar{\rho}(D + D_T)\nabla \widetilde{Y}_F^u) - \rho^u S_L \overline{\Sigma}\tilde{Z} - (1 - \tilde{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}_c}^{TKI}(\tilde{c})\tilde{Z} \tag{5.8}$$

Des travaux réalisés récemment [102] ont montré *via* des cas tests représentatifs du cliquetis, que le dégagement de chaleur pouvait être surestimé par cette modélisation. En présence d'un front de flamme déjà établi, une fois que l'intermédiaire réactionnel a atteint sa valeur seuil, l'auto-inflammation va se déclencher. Les taux de réaction initiaux associés sont alors interpolés dans la table à partir de l'avancement local $\tilde{c}$ produit par la propagation du front de flamme au lieu de démarrer d'un avancement nul.
Afin de surmonter cet inconvénient, une solution proposée consistait en un découplage de l'avancement dédié à la flamme de prémélange et de celui correspondant à l'auto-inflammation des gaz frais [102]. Pour ce faire, Michel *et al.* [102] ont introduit deux nouvelles quantités fictives, $\widetilde{Y}_F^{AI}$ la fraction massique de carburant consommée en AI et $\widetilde{Y}_F^{PF}$ la fraction massique de carburant consommée par la flamme de prémélange. Ces grandeurs sont reliées par la relation :

$$\widetilde{Y}_F^u = \widetilde{Z} - \widetilde{Y}_F^{AI} - \widetilde{Y}_F^{PF} \tag{5.9}$$

Sachant que des équations de transport ont déjà été formulées pour $\widetilde{Y_F^u}$ et $\widetilde{Z}$, la connaissance d'une seule des fictives proposées est nécessaire, la valeur de l'autre sera déterminée

grâce à l'équation (5.9). Une nouvelle variable d'avancement dédiée à la description de la progression de l'auto-inflammation peut alors s'écrire :

$$c^{AI-TKI} = \frac{\widetilde{Y}_F^{AI}}{\widetilde{Z} - \widetilde{Y}_F^{PF}} \tag{5.10}$$

$$= \frac{\widetilde{Y}_F^{AI}}{\widetilde{Y}_F^{AI} + \widetilde{Y}_F^{u}} \tag{5.11}$$

La quantité $\widetilde{Z} - \widetilde{Y}_F^{PF}$ représente la fraction massique de carburant qui reste à disposition pour une éventuelle consommation en AI. La correspondance entre les équations (5.10) et (5.11) provient du lien fourni par l'équation (5.9). L'équation d'évolution de $\widetilde{Y}_F^{AI}$ s'écrit alors en fonction de la variable c^{AI-TKI} suivant :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y}_F^{AI}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_F^{AI}) &= \nabla \cdot (\bar{\rho}(D + D_T)\nabla \widetilde{Y}_F^{AI}) \\ &\quad + (1 - \tilde{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI}(c^{AI-TKI})\tilde{Z} \end{aligned} \tag{5.12}$$

et l'équation de transport de $\widetilde{Y}_F^{u}$ est également impactée :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y}_F^{u}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_F^{u}) &= \nabla \cdot (\bar{\rho}(D + D_T)\nabla \widetilde{Y}_F^{u}) \\ &\quad - \rho^u S_L \overline{\Sigma}\tilde{Z} - (1 - \tilde{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI}(c^{AI-TKI})\tilde{Z} \end{aligned} \tag{5.13}$$

Enfin, les équations de transport des espèces chimiques s'écrivent, en intégrant les taux de réaction liés à l'auto-inflammation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}\widetilde{Y}_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_i) &= \nabla \cdot (\bar{\rho}(D + D_T)\nabla \widetilde{Y}_i) \\ &\quad + (\rho^u S_L \overline{\Sigma} + (1 - \tilde{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI}(c^{AI-TKI}))(\widetilde{Y}_i^{eq} - \widetilde{Y}_i^{u}|^u) \end{aligned} \tag{5.14}$$

Des extensions de ce modèle pour les hétérogénéités en richesse intégrant une pdf en fraction de mélange et un modèle de post-oxydation sont proposées au chapitre 6.

5.1.2 Modèle II

Domingo *et al.* [42] ont proposé un formalisme permettant de combiner les taux de réaction filtrés de l'auto-inflammation et de la flamme de prémélange pour le modèle PCM-FPI. Les scalaires φ^{PF} (respectivement φ^{AI}), représentant les taux de réaction laminaires ou les fractions massiques des espèces chimiques, sont obtenus à partir de calculs PREMIX de flammes laminaires stationnaires (respectivement de calculs SENKIN de réacteurs homogènes à pression constante) balayant les gammes de pressions, températures de gaz frais, compositions rencontrés lors du calcul de CFD. Une table FPI est alors générée dans laquelle les taux de réaction sont stockés sous la forme $\varphi(Z, c^*, T^u, P)$ où la variable d'avancement c^* s'écrit [62] :

$$c^* = \frac{Y_{CO} + Y_{CO_2}}{Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq}} \tag{5.15}$$

Il est possible de combiner les scalaires décrivant la flamme de prémélange et l'auto-inflammation laminaires à partir d'un facteur α dont la valeur évolue entre 0 et 1 :

$$\varphi(Z^*, c^*, T^{u*}, P^*) = \alpha\varphi^{AI}(Z^*, c^*, T^{u*}, P^*) + (1-\alpha)\varphi^{PF}(Z^*, c^*, T^{u*}, P^*) \tag{5.16}$$

En présumant la pdf en avancement par une β-pdf, les taux de réaction filtrés sont alors déduits de la formulation de l'équation (5.16) :

$$\begin{aligned}
\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x}, t) &= \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(c^*)\widetilde{P}(c^*; \underline{x}, t)dc^* \\
&= \alpha \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}^{AI}(c^*; \underline{x}, t)\widetilde{P}(c^*)dc^* + (1-\alpha)\int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}^{PF}(c^*; \underline{x}, t)\widetilde{P}(c^*)dc^* \\
&= \alpha\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{AI}(\underline{x}, t) + (1-\alpha)\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{PF}(\underline{x}, t)
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Détermination de la ségrégation locale

La pdf de la variable d'avancement $\widetilde{P}(c^*)$ doit alors être déterminée par la ségrégation de l'avancement S_c. Pour la modélisation que nous avons adoptée pour la flamme de prémélange turbulente, la ségrégation S_c^{PF} était déterminée algébriquement comme fonction de la densité de surface de flamme au travers de l'équation (3.34). Néanmoins, pour la modélisation de l'auto-inflammation avec PCM-FPI, Galpin *et al.* [58] et Domingo *et al.* [42] utilisent une équation de transport pour un scalaire permettant d'extraire le niveau local de ségrégation. La ségrégation n'étant pas identique pour les deux modes de combustion, il est ici choisi de fermer la ségrégation sous la forme :

$$S_c = \alpha S_c^{AI} + (1-\alpha)S_c^{PF} \tag{5.18}$$

où S_c^{AI} est la ségrégation en avancement générée par le phénomène d'auto-inflammation seul. Celle-ci est déduite de l'équation de transport suivante, par analogie avec les travaux de Galpin *et al.* et Domingo *et al.* :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\bar{\rho}Y_{cv}^{AI}}{\partial t} + \nabla\cdot\left(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}Y_{cv}^{AI}\right) &= \nabla\cdot\left(\bar{\rho}\left(D+D_T\right)\nabla Y_{cv}^{AI}\right) + 2\bar{\rho}(D+D_T)|\nabla\widetilde{Y}_c^{AI}|^2 \\
&\quad +2\bar{\rho}\tilde{\chi}_{Y_c}^{AI} + 2\bar{\rho}\left(\widetilde{Y_c\dot{\omega}_{Y_c}}^{AI} - \widetilde{Y}_c^{AI}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}^{AI}\right)
\end{aligned} \tag{5.19}$$

où $\widetilde{Y}_c^{AI}$ est la variable d'avancement fictive représentant la somme des fractions massiques de CO et de CO_2 produites par l'auto-inflammation seulement. $\widetilde{Y}_c^{AI}$ est la solution de l'équation de transport :

$$\frac{\partial\bar{\rho}\widetilde{Y}_c^{AI}}{\partial t} + \nabla\cdot(\bar{\rho}\tilde{\mathbf{u}}\widetilde{Y}_c^{AI}) = \nabla\cdot(\bar{\rho}(D+D_T)\nabla\widetilde{Y}_c^{AI}) + \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}^{AI} \tag{5.20}$$

Les taux de réaction filtrés apparaissant dans les équations (5.19) et (5.20) sont alors fermés comme :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}^{AI} = \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_c}^{AI}(c^*)\widetilde{P}(c^*; \tilde{c}^{AI}, S_c^{AI})dc^* \tag{5.21}$$

$$\widetilde{Y_c\dot{\omega}_{Y_c}}^{AI} = \int_0^1 Y_c^{AI}(c^*)\dot{\omega}_{Y_c}^{AI}(c^*)\widetilde{P}(c^*; \tilde{c}^{AI}, S_c^{AI})dc^* \tag{5.22}$$

où $\tilde{c}^{AI} = \widetilde{Y}_c^{AI}/\widetilde{Y}_c^{eq}$.

Concernant la dissipation scalaire $\bar{\rho}\tilde{\chi}_{Y_c}^{AI}$, celle-ci est fermée à partir de la formulation récente fournie par l'équation (3.14).
Les équations de transport étant fermées, il est possible d'exprimer la ségrégation liée à l'auto-inflammation, qui prend la forme suivante dans un cas d'une richesse homogène :

$$S_c^{AI} = \frac{Y_{cv}^{AI}}{\widetilde{Y}_c^{AI}(\widetilde{Y}_c^{eq} - \widetilde{Y}_c^{AI})} \tag{5.23}$$

Détermination du facteur α

Dans le cas où la flamme de propagation seule existe, en reprenant l'expression proposée par Domingo *et al.* pour α soit $\alpha = 1-\tilde{c}$, le taux de réaction pour la variable d'avancement s'écrit :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t) = \tilde{c}(\underline{x},t)\frac{\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}^{PF}(\underline{x},t)}{\widetilde{Y}_c^{eq}(\underline{x},t)} \tag{5.24}$$

Ainsi, le taux de réaction pour la flamme de prémélange reste inchangé du côté des gaz brûlés ($\tilde{c} \rightarrow 1$) mais sera affecté du côté des gaz frais ce qui risque de perturber la vitesse caractéristique de propagation du front de flamme turbulent. La formulation de l'équation (5.17) peut donc être modifiée de sorte à retrouver les cas limites c'est-à-dire obtenir une auto-inflammation ou une propagation pilotée uniquement par le taux de réaction turbulent correspondant. A cette fin, il est ici proposé de déterminer la valeur du paramètre α à partir d'une comparaison entre les taux de réaction $\rho^u S_L \overline{\Sigma}(\tilde{c})\widetilde{Y}_c^{eq}$ et $\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}^{AI}(\tilde{c}^{AI})$. L'évolution du paramètre α en fonction du rapport
$r_{\dot{\omega}} = \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}^{AI}(\tilde{c}^{AI})/\rho^u S_L \overline{\Sigma}(\tilde{c})\widetilde{Y}_c^{eq}$ est modélisée par la fonction :

$$\alpha = \frac{1}{2}\left(1 + tanh\left(\frac{r_{\dot{\omega}} - 1.0}{0.2}\right)\right) \tag{5.25}$$

La figure 5.2 représente la valeur prise par α en fonction du rapport des taux de réaction : un mode de combustion devient prépondérant (α=0 ou α=1) dès que le taux de réaction associé devient le double de l'autre.

Concernant l'intégration du formalisme FPI et par extension PCM-FPI dans le solveur, de précédents travaux [59, 119] ont proposé une reconstruction locale des taux de réaction des espèces chimiques à partir de la tabulation des fractions massiques plutôt que l'utilisation directe de l'intégration des taux de réaction laminaires par des pdf. Ainsi, le taux de réaction de l'espèce i en auto-inflammation seule s'écrit :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{AI}(\underline{x},t) = \bar{\rho}\frac{\widetilde{Y}_i^{AI}(\tilde{c}(\underline{x},t) + \gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c(\underline{x},t), S_c(\underline{x},t), T^u(\underline{x},t)) - \widetilde{Y}_i(\underline{x},t)}{\gamma\delta_t} \tag{5.26}$$

où :

$$\widetilde{Y}_i^{AI} = \int_0^1 Y_i^{AI}(c^*)\widetilde{P}(c^*;\tilde{c},S_c)dc^* \tag{5.27}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI} = \int_0^1 \dot{\omega}_c^{AI}(c^*)\widetilde{P}(c^*;\tilde{c},S_c)dc^* \tag{5.28}$$

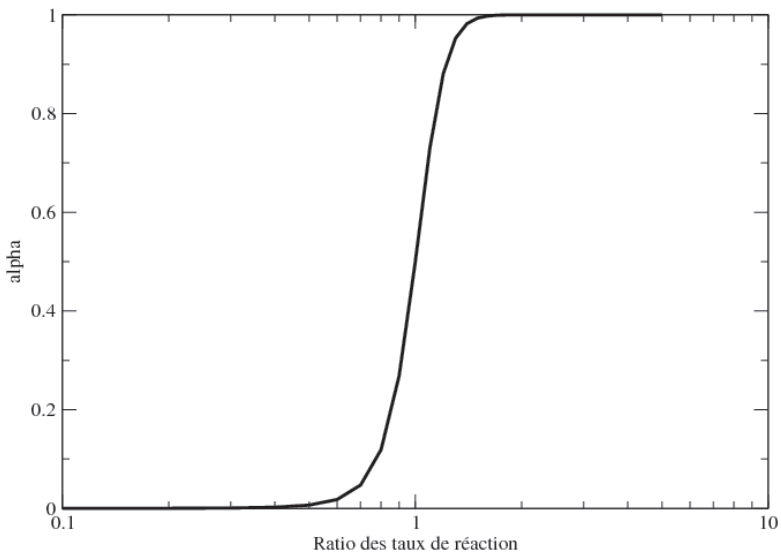


FIG. 5.2 – Evolution de la valeur du paramètre α en fonction du ratio $r_{\dot{\omega}}$.

En reprenant ce formalisme et en utilisant l'équation (5.17), il est possible d'écrire le taux de réaction filtré intégrant l'auto-inflammation et la combustion par la propagation de flamme sous la forme :

$$\begin{aligned}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} &= \alpha\frac{\widetilde{Y}_i^{AI}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI},S_c)-\widetilde{Y}_i}{\gamma\delta_t}\\ &\quad+(1-\alpha)\frac{\widetilde{Y}_i^{PF}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{PF},S_c)-\widetilde{Y}_i}{\gamma\delta_t}\end{aligned} \tag{5.29}$$

où pour rappel, $\widetilde{Y}_i^{PF}(\underline{x},t)=\int_0^1 Y_i^{PF}(c^*)\widetilde{P}(c^*;\tilde{c},S_c)dc^*$.

Cohérence entre les taux de réaction

Il est intéressant de noter que la formulation de l'équation (5.29) garantit que la somme des taux de réaction $\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_{CO}}$ et $\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_{CO_2}}$ est identique au taux de réaction $\widetilde{\dot{\omega}}_c\widetilde{Y_c^{eq}}$. En effet :

$$\begin{aligned}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_{CO}}+\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_{CO_2}} &= \frac{(\alpha\widetilde{Y}_c^{AI}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI})+(1-\alpha)\widetilde{Y}_c^{PF}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{PF}))-\widetilde{Y}_c}{\gamma\delta_t}\\ &= \frac{(\alpha\widetilde{Y}_c^{eq}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI})+(1-\alpha)\widetilde{Y}_c^{eq}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{PF}))-\widetilde{Y}_c}{\gamma\delta_t}\\ &= \frac{\alpha\widetilde{Y}_c^{eq}\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI}+(1-\alpha)\widetilde{Y}_c^{eq}\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{PF}}{\gamma\delta_t}\\ &= \alpha\widetilde{Y}_c^{eq}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI}+(1-\alpha)\widetilde{Y}_c^{eq}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{PF}\\ &= \widetilde{Y}_c^{eq}\widetilde{\dot{\omega}}_c\end{aligned} \tag{5.30}$$

Des tests correspondant à cette formulation sont présentés plus loin dans le manuscrit. Enfin, en envisageant une application de cette modélisation à un milieu stratifié en richesse, il est possible d'intégrer une pdf en fraction de mélange comme expliqué au chapitre 6.

Approximations liées à l'application au calcul moteur

Pour la modélisation de la flamme de prémélange, la connaissance de la composition chimique interne au front de flamme présente peu d'intérêt pour l'application au moteur automobile. Dans le sens où les compositions finales fournies par un calcul de réacteur homogène à pression constante et un calcul de flamme laminaire stationnaire sont très proches, il est possible d'exploiter pour la modélisation de la flamme de prémélange une table constituée à partir de calculs de réacteurs homogènes (sous couvert, bien entendu, de se placer dans des conditions où l'auto-inflammation peut se produire). Cette approximation permet donc de n'utiliser qu'une table pour la modélisation simultanée des deux phénomènes et permet de s'abstenir de calculs PREMIX coûteux en temps CPU lorsqu'on simule la combustion en flamme de prémélange des carburants lourds dans les moteurs. Ce choix pose un problème pour la détermination de la ségrégation S_c^{PF}, celle-ci étant pour rappel fonction d'échelles de longueur de la flamme laminaire au travers de l'expression :

$$S_c^{PF} = 1 - \frac{\overline{\Sigma}\delta^*}{\bar{\rho}\tilde{c}(1-\tilde{c})} \quad \text{avec} \quad \delta^* = \int_{0^+}^{1^-} \frac{\rho(c^*)c^*(1-c^*)}{|\nabla c^*|} dc^* \tag{5.31}$$

Cet inconvénient peut être levé en trouvant une estimation algébrique de la quantité δ^*. Ceci est permis en écrivant que le gradient de l'avancement de la flamme laminaire $|\nabla c^*|$ est parabolique soit une expression de la forme : $|\nabla c^*| \approx Kc^*(1-c^*)$. Sachant que la valeur maximale de ce gradient est atteinte en $c^* = 1/2$ et que l'épaisseur de flamme laminaire δ_L correspond à l'inverse du maximum du gradient de la variable d'avancement, il vient :

$$|\nabla c^*| \approx \frac{4c^*(1-c^*)}{\delta_L} \tag{5.32}$$

D'autre part, la variation de la densité avec l'avancement $\rho(c^*)$ peut s'écrire :

$$\rho(c^*) = \frac{\rho^u}{1+\tau c^*} \tag{5.33}$$

En intégrant les expressions (5.32) et (5.33) dans l'équation (5.31), il vient :

$$\delta^* \approx \frac{\rho^u \delta_L}{4} \frac{ln(1+\tau)}{\tau} \tag{5.34}$$

ce qui permet finalement d'exprimer S_c^{PF}.

5.2 Cas tests monodimensionnels

La fonctionnalité des transitions d'un mode de combustion à l'autre est ici étudiée.
Le premier cas test correspond à une auto-inflammation locale suivie par l'établissement d'un front de flamme issu du gradient entre les gaz brûlés et les gaz frais et sa propagation. Dans ce cas, l'état initial correspond à un volume de gaz frais à pression atmospherique et dont la température est stratifiée. Les réactions d'auto-inflammation sont promues par le fort niveau de température tandis qu'elles seront très limitées dans la zone froide, permettant d'assurer la propagation du front de flamme. Dans le contexte de l'automobile, ce mode de combustion est rencontré lors de diverses situations :

– en moteur Diesel : l'auto-inflammation après mélange du carburant évaporé et de l'air contenu dans la chambre est suivie par l'établissement d'une flamme prémélangée qui va former des suies [39] ;

– en moteur à allumage commandé : ceci apparaît dans le cas particulier du pré-allumage, essentiellement rencontré dans les moteurs fortement suralimentés à bas régime. Le déroulement du phénomène est le suivant : une auto-inflammation se produit dans la chambre avant ou peu après l'allumage par bougie, initiant un front de flamme qui se propage vers les gaz frais en les comprimant ; cette compression peut aboutir à une auto-inflammation en masse du mélange air/carburant imbrûlé [165]. Ce phénomène est beaucoup plus violent que le cliquetis puisque l'auto-inflammation se produit plus précocément et concerne une masse de gaz frais plus importante. Un processus analogue a déjà été observé dans des machines à compression rapide pour lesquelles le carburant était de l'iso-octane : l'auto-inflammation se déroule alors soit en masse, soit par une auto-inflammation locale suivie par propagation d'un front qui comprime les gaz frais restant provoquant ainsi leur combustion en masse [162].

Le second cas test est plus conventionnel et correspond à une modélisation du cliquetis. Celui-ci correspond à la propagation d'un front de flamme dans un volume fermé dans des conditions thermodynamiques (fortes pression et température de gaz frais) favorisant l'auto-inflammation des gaz frais contenus entre le front de flamme et la paroi.

Le carburant pris en compte dans ce qui suit est le n-heptane, sachant que celui-ci s'auto-inflamme très facilement et que les méthodes de tabulation pour cette espèce sont bien connues [119]. Le mécanisme cinétique réduit proposé par Patel *et al.* [117] est repris pour cette étude. Les tables sont réalisées à partir de calculs de réacteurs homogènes à pression constante et à richesse unitaire et comportent :

– 11 points en pression, entre 1 et 90 $bars$;

– 29 points en température de gaz frais, entre 400 K et 1200 K ;

– 50 points en avancement.

5.2.1 Principe des calculs

Etant donné qu'il ne s'agit que de vérifier l'intégration des modélisations préalablement détaillées, les calculs sont ici réalisés pour des topologies monodimensionnelles. D'autre part, la cible étant l'utilisation pour des calculs moteur, une taille caractéristique de maille de 1 mm est ici choisie et la turbulence est figée (c'est-à-dire constante spatialement) pour les calculs. Celle-ci est définie comme : $\nu_T = Cu'_\Delta \Delta$ où $\Delta = 1\ mm$ et $u'_\Delta = 1.0\ m.s^{-1}$. Les quantités Δ et u'_Δ apparaissent également dans le terme d'étirement de sous-maille du modèle ECFM-LES.

Cas du pré-allumage

Le domaine de calcul mesure 63 cm de long et est composé de mailles de taille régulière. Les conditions limites choisies sont représentées sur la figure 5.3. Initialement le domaine est rempli de gaz frais et comporte une stratification en température de gaz frais, celle-ci évoluant de manière monotone de 800 K à 400 K.

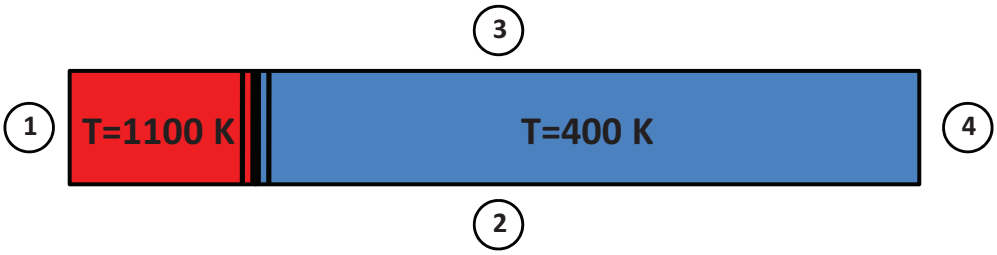


FIG. 5.3 – Initialisation du cas test 1 : domaine rempli de gaz frais et stratification en température. Conditions limites : 1. symétrie, 2. 3. et 4. : parois glissantes adiabatiques.

Cas cliquetis

Le domaine de calcul est le même que pour le cas précédent. Cette fois un front de flamme est initié dans un milieu dont la température de gaz frais initiale est de 800 K et la pression de 20 $bars$. Cette solution initiale et les conditions limites sont schématisées par la figure 5.4.

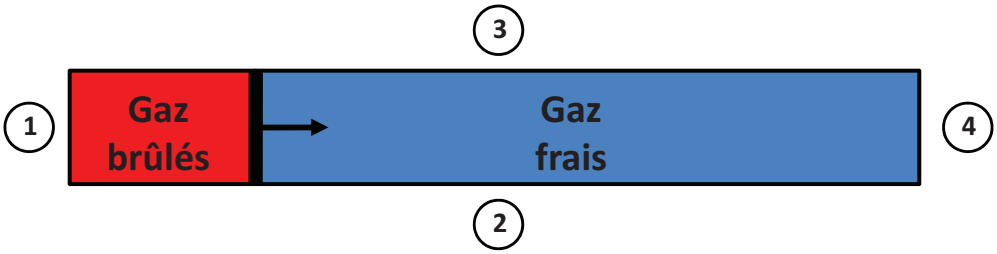


FIG. 5.4 – Initialisation du cas test 2 : présence d'un front de flamme. Conditions limites : 1., 2.,3. et 4. : parois glissantes adiabatiques.

5.2.2 Résultats

Les résultats obtenus par les modèles I et II sont détaillés dans ce qui suit pour chaque type de transition.

Cas du pré-allumage

L'évolution temporelle prédite par le modèle I est représentée sur la figure 5.5.(a) au travers des évolutions de température, de la densité de surface de flamme, de la variable d'avancement et d'un avancement spécifique à la réaction d'auto-inflammation ($\widetilde{Y}_F^{AI}/\widetilde{Z}$).

Partant d'une situation où le domaine ne contient que des gaz frais (t = 0 ms), l'intermédiaire réactionnel $\widetilde{Y}_{IR}$ est produit suivant un taux de croissance fonction des paramètres thermodynamiques locaux. Si sa valeur seuil ($\widetilde{Z}$) est localement atteinte, le taux de réaction lié à l'auto-inflammation est alors interpolé dans la table chimique entraînant la croissance de l'avancement $\tilde{c}$ et de la fraction massique de carburant consommée par l'auto-inflammation $\widetilde{Y}_F^{AI}$. L'évolution temporelle de $\tilde{c}$ conduit à la création de gradients de cette variable ce qui correspond à la création de densité de surface de flamme $\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}$. Ainsi, la consommation des gaz frais dans la zone où l'auto-inflammation s'est initialement déclenchée est due à la fois à ce premier mode et à la présence d'une densité de surface de flamme. Ceci est illustré par la figure 5.5.(a) aux temps t = 10.2 ms, t = 10.5 ms et t = 12.2 ms.
Une fois que les gaz frais sont consommés en aval du front de flamme (matérialisé par la densité de surface de flamme), celui-ci se propage vers les gaz frais (t = 12.5 ms). La quantité $\widetilde{Y}_F^{AI}/\widetilde{Z}$ n'atteint jamais l'unité, quelque soit le temps considéré, ce qui veut dire que la combustion dans la zone de forte température de gaz frais a toujours impliqué une consommation partielle des gaz frais liée à la présence de la densité de surface de flamme.

Pour le modèle II, le fonctionnement diffère légèrement (voir figure 5.5.(b)).
La variable d'avancement non normalisée $\widetilde{Y}_c^{AI}$ décrit la progression de la réaction d'auto-inflammation comme si celle-ci se déroulait seule et son taux de réaction est comparé au taux de réaction lié à la consommation des gaz frais par la flamme de prémélange. Ceci permet de déterminer quel mode de combustion est prépondérant pour l'estimation du taux de réaction principal. La combustion est ainsi initiée par auto-inflammation et suivie par une combustion mixte entre auto-inflammation et combustion associée à la présence d'une densité de surface de flamme (de t = 4.9 ms à t = 5.5 ms). De la même façon que précédemment pour le modèle I, la combustion s'achève par la propagation d'un front de flamme vers la zone de gaz frais (de t = 6.1 ms à t = 17.8 ms).
Notons enfin que la cinétique de la combustion mixte est plus rapide pour le modèle II que pour le modèle I. En effet, il existe un front de flamme centré en x = 0.2 m à t = 6.1 ms avec le modèle II tandis que ce même avancement de la combustion est obtenu pour un temps t = 12.5 ms environ avec le modèle I. Cette différence peut s'expliquer par :

- la modélisation de l'auto-inflammation ; le modèle II intègre une β-pdf pour modéliser la distribution de l'avancement et fermer le taux de réaction filtré. Celui-ci peut donc prendre des valeurs plus importantes que le taux de réaction laminaire (utilisé dans le modèle I) aux faibles niveaux d'avancement pour de faibles valeurs de facteurs de ségrégation S_c [59] ;

- la fermeture du coefficient α ; celle-ci compare les taux de réaction du modèle II et sa forme est arbitraire. Il n'est pas garanti qu'elle permette de retrouver la même cinétique que le modèle I pour un cas laminaire.

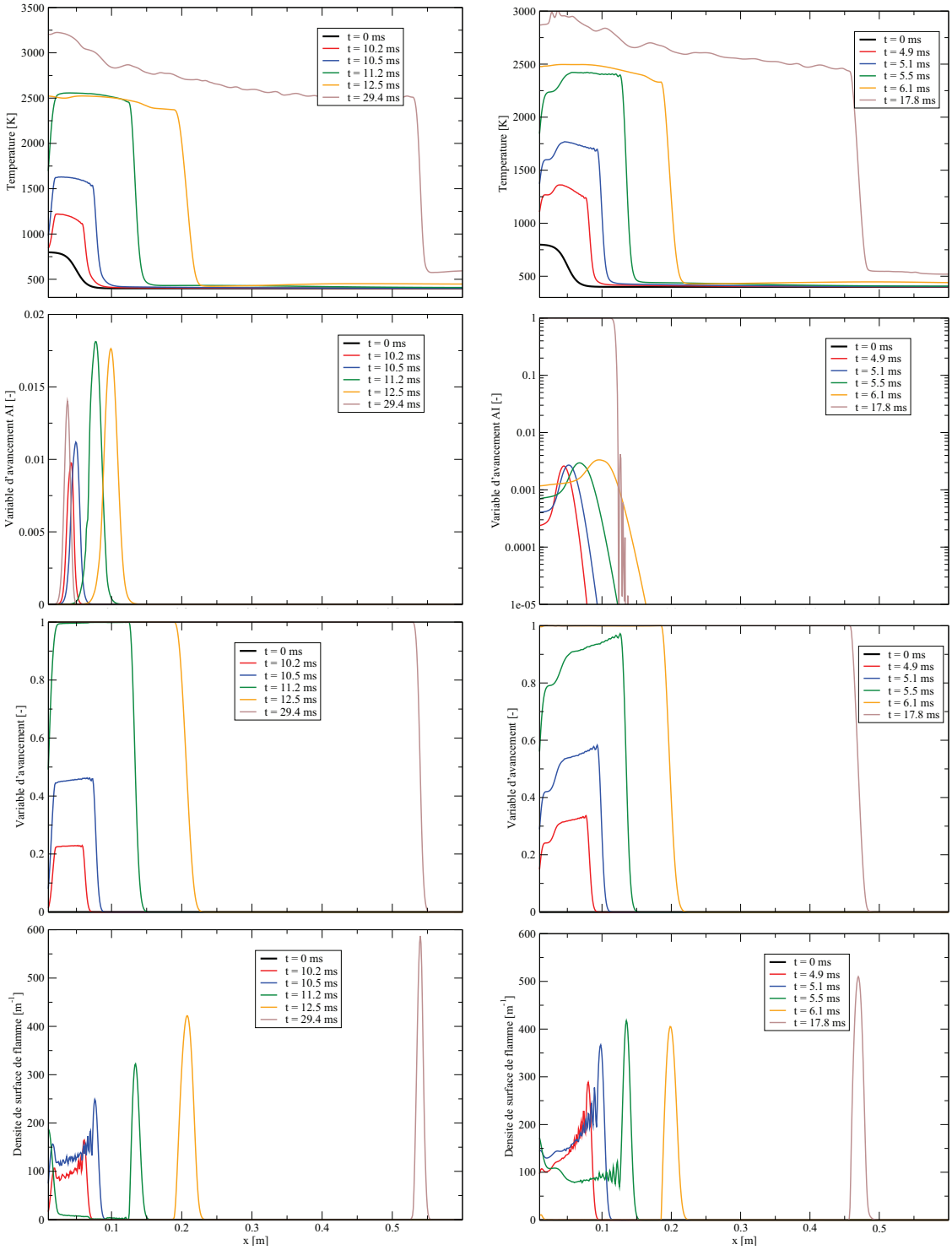
Finalement, le modèle I semble préférable puisqu'il n'intègre pas de fonction arbitraire pour régir la transition entre les deux modes de combustion et que la cinétique de l'auto-inflammation n'est pas impactée par la turbulence comme cela se produit pour le modèle

II à travers la pdf en avancement fermée par une β-pdf.

Cas cliquetis

Dans ce second cas, la situation initiale correspond à l'existence d'un front de flamme, tel que représenté à l'instant t = 0 ms sur la figure 5.6.(a) par le profil de densité de surface de flamme. Ce front de flamme se propage vers les gaz frais en les consommant (entre t = 0 ms et t = 18.6 ms), ceci étant figuré par la propagation du profil de surface de flamme, l'élévation des niveaux de température et d'avancement. A t = 21.6 ms, un début de consommation des gaz frais par auto-inflammation est perceptible puisque la variable d'avancement spécifique à l'auto-inflammation a déjà augmenté, de même que la température en amont du front du flamme. A t = 24 ms, tous les gaz frais ont été consommés ($\tilde{c} = 1$ partout) et la densité de surface de flamme a disparu. Le profil final de l'avancement spécifique à l'auto-inflammation montre que plus de 80% du carburant a été consommé par ce mode de combustion sur la droite du domaine, le reste étant du à la présence de gradient de variable d'avancement. Ainsi la phénoménologie caractéristique du cliquetis, à savoir l'auto-inflammation des gaz frais contenus entre la paroi et le front de flamme, a été reproduite.

Le point de départ pour le modèle II est le même que le premier modèle à savoir qu'un front de flamme est initialisé dans le domaine. Celui-ci se propage vers les gaz frais (entre t = 0 ms et t = 6.2 ms, voir figure 5.6.(b)), tandis qu'indépendamment, la variable d'avancement liée à l'auto-inflammation croît. Le taux de réaction associé à celle-ci $\bar{\rho}\widetilde{\omega}_{Y_c}^{AI}(\tilde{c}^{AI})$ étant prépondérant du côté des gaz frais, le mécanisme d'auto-inflammation est responsable de l'augmentation d'avancement de de température dans cette zone, tel que représenté à t = 7.5 ms et t = 8.0 ms. Cette réaction s'achève et à t = 8.6 ms, la combustion est terminée, tous les gaz frais ayant été consommés.
Notons qu'une fois encore, la cinétique liée à la prédiction de l'auto-inflammation par le modèle II est plus rapide qu'avec le modèle I.



(a) (b)

FIG. 5.5 – Transition "auto-inflammation vers la flamme de prémélange". (a) modèle I, (b) modèle II. De haut en bas : évolutions de la température, des variables d'avancement et de la densité de surface de flamme.

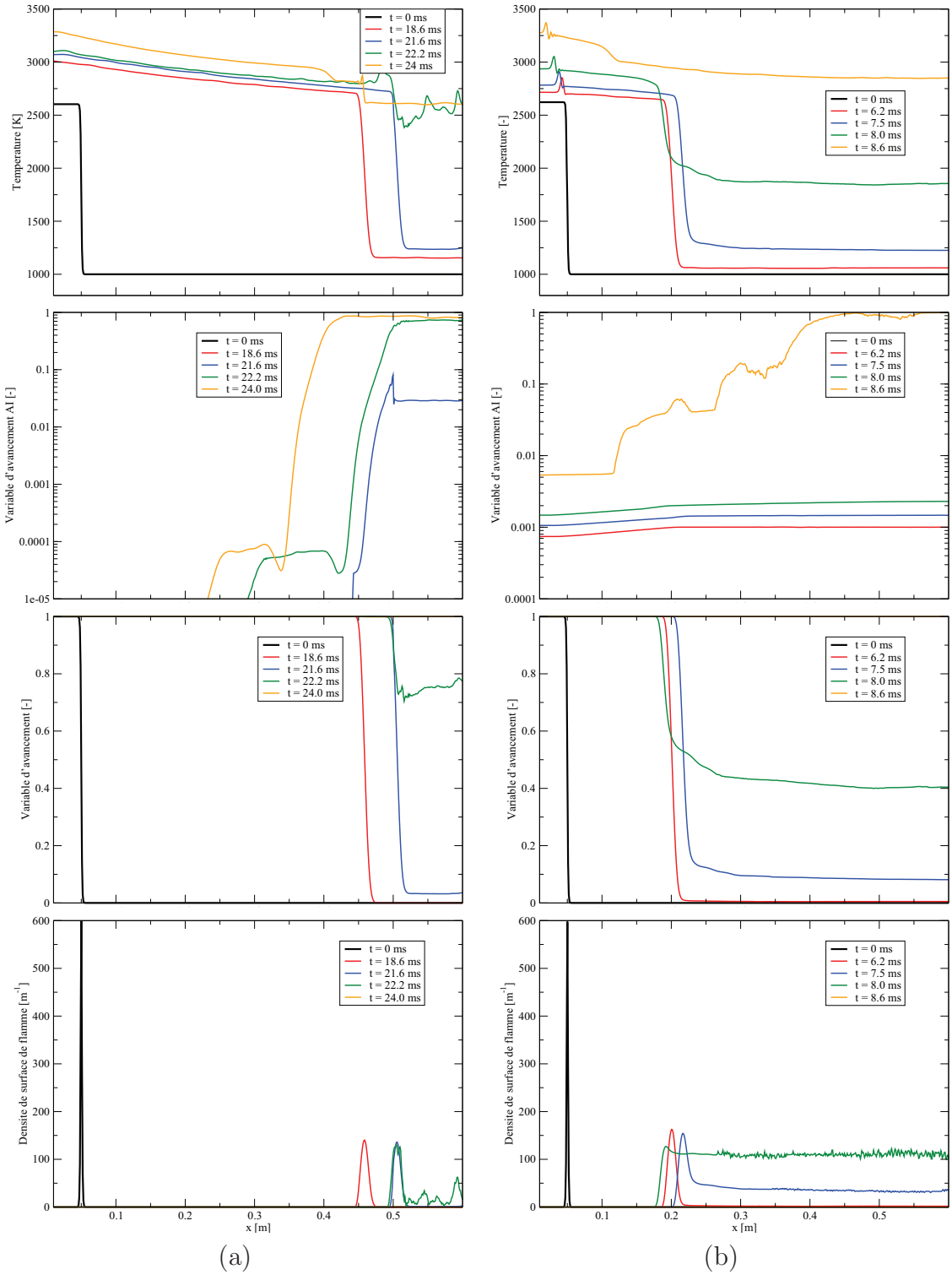


FIG. 5.6 – Transition “flamme de prémélange vers auto-inflammation”. (a) modèle I, (b) modèle II. De haut en bas : évolutions de la température, des variables d'avancement et de la densité de surface de flamme.

5.3 Conclusion

Dans ce chapitre, les modèles PCM-CFM I et II présentés au préalable pour la modélisation des flammes de prémélange ont été étendus pour la prise en compte de l'auto-inflammation (modèles I et II).
Concernant le modèle I, l'extension a consisté à intégrer une modélisation type TKI. Le déclenchement de l'auto-inflammation est détecté lorsque l'intermédiaire réactionnel, une variable fictive dont l'évolution est pilotée par un délai caractéristique tabulé, atteint sa valeur seuil. Le taux de réaction dédié à l'auto-inflammation est alors interpolé dans une table chimique constituée à partir de calculs préalables de réacteurs homogènes à pression constante. Une nouvelle variable fictive figurant la fraction massique de carburant consommée en auto-inflammation est introduite de sorte à décrire un avancement spécifique à l'auto-inflammation.
Pour le modèle II, la modélisation développée pour la flamme de prémélange et celle de Jérémy Galpin pour l'auto-inflammation sont combinées au travers d'une formulation pondérée. Le poids est ici modélisé par une fonction rendant compte de la prépondérance de l'un ou l'autre des modes de combustion à travers leur cinétique respective.
Les modèles étendus ont enfin montré leur fonctionnalité pour la modélisation des transitions "auto-inflammation vers flamme de prémélange" et "flamme de prémélange vers auto-inflammation", correspondant respectivement à des cas de pré-allumage et de cliquetis pouvant se produire lors de modélisations de combustions anormales dans un moteur à allumage commandé.
Des différences ont été constatées pour les vitesses caractéristiques de combustion d'un modèle à l'autre. Elles sont essentiellement expliquées par : des fermeture différentes pour les taux de réaction filtrés d'auto-inflammation (tirés de tables TKI pour le modèle I, fermés à partir d'une β-pdf et de tables FPI pour le modèle II) et des modélisations différentes de la transition d'un mode de combustion à l'autre pour les deux modèles (basée sur un intermédiaire réactionnel pour le modèle I et sur une fonction arbitraire pour le modèle II). Le modèle I présentant un formalisme plus simple que le modèle II et proche de modèles moteur déjà utilisés comme ECFM-3Z, il semble être préférable pour des calculs moteur.

Chapitre 6

Extension des modèles aux modes de combustion stratifiés

Les modèles I et II peuvent être, dans leur état actuel, utilisés pour la modélisation de combustions en moteur à allumage commandé homogènes en richesse. Les éventuelles stratifications en richesse seraient majoritairement résolues par le maillage. Néanmoins, pour des applications moteurs à injection directe, il devient nécessaire d'intégrer les effets liés aux stratifications pouvant exister au niveau de la sous-maille. Le présent chapitre propose à cette fin des extensions théoriques aux modèles I et II, qui n'ont pas été testées dans le cadre de la thèse.
Le modèle I ayant un formalisme simple, plusieurs modifications peuvent lui être apportées pour améliorer ses capacités prédictives à partir de modélisations proposées récemment pour l'auto-inflammation en milieu turbulent hétérogène en richesse. Concernant le modèle II, l'extension est essentiellement réalisée en utilisant une pdf en fraction de mélange pour l'estimation des taux de réaction filtrés.

6.1 Extensions du modèle I

6.1.1 Modélisation des effets des stratifications en richesse de sous-maille pour la partie propagative

Les taux de réaction des espèces chimiques associés au modèle I peuvent être écrits de manière plus générale sous la forme :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) = \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(Z^*,c^*)\widetilde{P}(Z^*,c^*;\underline{x},t)dZ^*dc^* \tag{6.1}$$

où la pdf jointe peut être décomposée comme $\widetilde{P}(Z^*,c^*) = \overline{P}(c^*|Z^*)\widetilde{P}(Z^*)$.
Cette forme peut être simplifiée en reprenant l'hypothèse intrinsèque de PCM-FPI [156] : $\overline{P}(c^*|Z^*) \approx \overline{P}(c^*)$.
Pour rappel, la pdf en avancement s'écrit :

$$\overline{P}(c^*;\underline{x},t) = (1-\bar{c}(\underline{x},t))\delta(c^*) + \frac{\overline{\Sigma}(\underline{x},t)}{|\nabla c^*|}H(c^*)H(1-c^*) + \bar{c}(\underline{x},t)\delta(1-c^*) \tag{6.2}$$

Quant à la pdf en fraction de mélange, elle est présumée à partir d'une fonction β.
Les taux de réaction sont déduits de l'équation (6.1), en négligeant les taux de réaction associés à la chimie de post-oxydation (*i.e.* pour $c = 1$) :

$$\begin{aligned}
\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}(\underline{x},t) &= (1-\bar{c}(\underline{x},t))\int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(Z^*,c^*=0)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \\
&\quad +\overline{\Sigma}(\underline{x},t)\int_0^1 \rho^u(Z^*)S_L(Z^*)(Y_i^{eq}(Z^*)-Y_i^u(Z^*))\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \\
&\quad +\bar{c}(\underline{x},t)\int_0^1 \dot{\omega}_{Y_i}(Z^*,c^*=1)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \\
&= (1-\bar{c}(\underline{x},t))\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{AI} \\
&\quad +\overline{\Sigma}(\underline{x},t)(\widetilde{\rho^u S_L Y_i^{eq}}-\widetilde{\rho^u S_L Y_i^u}) \qquad (6.3)
\end{aligned}$$

où :

$$\widetilde{\rho^u S_L Y_i^{eq}} = \int_0^1 \rho^u(Z^*)S_L(Z^*)Y_i^{eq}(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \qquad (6.4)$$

$$\widetilde{\rho^u S_L Y_i^u} = \int_0^1 \rho^u(Z^*)S_L(Z^*)Y_i^u(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \qquad (6.5)$$

La quantité S_L serait déterminée par des calculs PREMIX de flammes laminaires ou par la corrélation de Metghalchi et Keck [98] comme dans ECFM-LES, de sorte à exprimer les quantités $\rho^u(Z^*)S_L(Z^*)Y_i^u(Z^*)$ et $\rho^u(Z^*)S_L(Z^*)Y_i^{eq}(Z^*)$ lors de la création de la table. Une limitation liée à cette approche est que l'on négligerait alors les effets d'historique liés à la chimie pour l'estimation de S_L. En effet, lorsque la flamme laminaire au cours de son évolution traverse des zones de richesse variable pour finir par se trouver dans une zone de richesse ϕ_0, sa vitesse de propagation est différente de la vitesse qu'elle aurait eu en milieu homogène de cette même richesse [125].
La vitesse de flamme laminaire S_L apparaît aussi dans des termes de l'équation de transport de $\overline{\Sigma}$ (courbure résolue, propagation plane et destruction de sous-maille). Afin d'intégrer l'adoption de la pdf en fraction de mélange au niveau de ces termes, il convient donc de remplacer S_L par $\widetilde{S}_L$ où :

$$\widetilde{S}_L = \int_0^1 S_L(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \qquad (6.6)$$

D'autre part, les scalaires $\tilde{c}$ et $\bar{c}$ apparaissent au niveau de termes de l'équation de transport de $\overline{\Sigma}$. $\tilde{c}$ étant fermé comme $\tilde{c} = 1 - \widetilde{Y}_F^u/\widetilde{Z}$, il reste à exprimer $\bar{c}$. De la même façon que pour le modèle I, la partie interne de la pdf est négligée pour lier $\bar{c}$ et $\tilde{c}$ et de la même façon que dans les travaux de Domingo *et al.* [40], il vient :

$$\bar{c} = \frac{\tilde{\rho}^u\tilde{c}}{\tilde{\rho}^b + (\tilde{\rho}^u - \tilde{\rho}^b)\tilde{c}} \qquad (6.7)$$

où $\tilde{\rho}^u$ et $\tilde{\rho}^b$ sont exprimés comme :

$$\widetilde{\rho}^u = \int_0^1 \rho^u(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \qquad (6.8)$$

$$\widetilde{\rho}^b = \int_0^1 \rho^b(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \qquad (6.9)$$

La propagation de flamme en milieu stratifié est ainsi traitée de façon analogue au travail de Domingo *et al.* [40], à ceci près que le plissement de sous-maille Ξ est ici déterminé indirectement par l'équation de transport de ECFM-LES.

6.1.2 Modélisation des effets de la stratification pour la modélisation de l'auto-inflammation

Dans le cas d'une combustion dans un moteur essence à injection directe, les effets des stratifications de richesse sur une éventuelle auto-inflammation sont à prendre en compte. Ceci est tout d'abord réalisé par l'utilisation d'une pdf en fraction de mélange, représentant les stratifications de richesse en sous-maille. Puis, un modèle est proposé qui intègre les effets de l'étirement sur la cinétique de l'auto-inflammation et sur l'état d'équilibre chimique.

Intégration de la pdf en fraction de mélange à la modélisation TKI : TKI-pdf

La fermeture du taux de réaction lié à l'avancement correspond au modèle proposé par Subramanian [143] dans le cadre de sa thèse :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI}(\underline{x},t) = \int_0^1 \dot{\omega}_c^{TKI}(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \tag{6.10}$$

La seule réaction d'auto-inflammation serait alors modélisée au travers du taux de réaction suivant, par analogie avec l'équation (5.6) :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{AI}(\underline{x},t) = (1-\bar{c})\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI}(\widetilde{Y}_i^{eq} - \widetilde{Y}_i^{u}) \tag{6.11}$$

où :

$$\widetilde{Y}_i^{eq} = \int_0^1 Y_i^{eq}(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \tag{6.12}$$

$$\widetilde{Y}_i^{u} = \int_0^1 Y_i^{u}(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \tag{6.13}$$

Il est possible de raffiner ce modèle en tabulant un taux de réaction pour l'auto-inflammation qui tient compte des flux diffusifs associés à une auto-inflammation se déroulant dans un milieu stratifié en richesse.

Intégration des effets diffusifs liés à la stratification : modèle mixte TKI-pdf/ADF-PCM

Des améliorations peuvent être portées à l'estimation du taux de réaction en auto-inflammation en s'inspirant des travaux de Michel [99]. Le fonctionnement du modèle ADF-PCM étant présenté en détail par ailleurs [99], il n'est décrit que succintement dans ce qui suit.

Approximation de la flamme de diffusion par ADF-PCM
Ce modèle repose sur la résolution de l'équation de flammelette de Peters pour l'avancement non normalisé Y_c (qui matérialise la somme des fractions massiques de CO et de CO_2). Celle-ci s'écrit :

$$\frac{\partial Y_c}{\partial t} = \dot{\omega}_{Y_c} + \chi_Z \frac{\partial^2 Y_c}{\partial Z^2} \tag{6.14}$$

où χ_Z est le taux de dissipation scalaire qui peut s'écrire comme une fonction de la fraction de mélange Z et de l'étirement a. Le taux de réaction $\dot{\omega}_{Y_c}$ provient de calculs préalables de réacteurs homogènes. Ceci permet l'approximation d'une flamme de diffusion laminaire tenant compte des effets de chimie complexe pour des temps de calcul raisonnables. Cette approximation est ensuite utilisée pour la modélisation de la combustion en flamme de diffusion en milieu turbulent. Ainsi, les quantités physiques moyennes rendant compte de la structure de la flamme de diffusion turbulente $\widetilde{\varphi}$ sont exprimées à partir des quantités issues du calcul de la flammelette approximée comme :

$$\widetilde{\varphi}(\widetilde{Z}, S_Z, t, a) = \int_0^1 \varphi(Z^*, t, a)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \tag{6.15}$$

Une variable d'avancement moyenne pour le modèle $\bar{c}^{ADF}$ peut s'écrire :

$$\bar{c}^{ADF}(\widetilde{Z}, S_Z, t, a) \approx \frac{\int_0^1 Y_c(Z^*, t, a)\widetilde{P}(Z^*)dZ^*}{\int_0^1 Y_c(Z^*, t_{final}, a)\widetilde{P}(Z^*)dZ^*} = \frac{\widetilde{Y}_c^{ADF}}{\widetilde{Y}_c^{eq-ADF}} \tag{6.16}$$

ce qui permet de stocker les quantités moyennes dans une table sous la forme $\widetilde{\varphi}(\widetilde{Z}, S_Z, \bar{c}^{ADF}, a)$. L'avancement non normalisé moyen $\widetilde{Y}_c^{ADF}$ provient dans le code de CFD de la résolution d'une équation de transport dont le taux de réaction est $\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c^{ADF}}$. Il a tout d'abord été estimé à partir de la flammelette approximée comme :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c^{ADF}}(\widetilde{Z}, S_Z, t, a) = \int_0^1 \frac{\partial Y_c}{\partial t}(Z^*, t, a)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \tag{6.17}$$

puis tabulé en fonction de la variable d'avancement moyenne : $\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c^{ADF}}(\widetilde{Z}, S_Z, \bar{c}^{ADF-PCM}, a)$.

Proposition d'un modèle mixte entre TKI-pdf et ADF-PCM
Le modèle ADF-PCM peut donner un point de départ pour l'intégration des effets diffusifs apparaissant au cours de l'auto-inflammation en amont du front de flamme. Alors que l'avancement d'écriture de la table TKI est fonction de la température, cette grandeur n'est pas disponible lors de la résolution de l'équation de flammelette (Eq. (6.14)). Soit la résolution de cette équation peut être accompagnée de la résolution d'une équation pour l'énergie pour rester proche du formalisme TKI, soit la table de dégagement de chaleur peut être écrite en fonction de l'avancement de l'équation (6.16). Une approximation serait alors réalisée de la même façon que dans TKI puisque la variable de lecture pour l'avancement ne serait pas la même que celle dédiée à l'écriture de la table. Le taux de réaction des espèces chimiques correspondant à la réaction d'auto-inflammation serait donc :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{TKI-ADF} = \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI-ADF}(c^{AI-TKI})(\widetilde{Y}_i^{eq-ADF} - \widetilde{Y}_i^u) \tag{6.18}$$

où $\widetilde{Y}_i^{eq-ADF} = \int_0^1 Y_i(\bar{c}^{ADF} = 1, Z^*, a)\widetilde{P}(Z^*)dZ^*$.

Quant au taux de réaction global intégrant les combutions par auto-inflammation et propagation de flamme, il s'écrit :

$$\begin{aligned}\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} &= (1-\bar{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI-ADF}(c^{AI-TKI})(\widetilde{Y}_i^{eq-ADF}-\widetilde{Y}_i^u) \\ &\quad +\overline{\Sigma}_{\bar{c}}(\widetilde{\rho^u S_L Y_i^{eq-ADF}}-\widetilde{\rho^u S_L Y_i^u})\end{aligned} \tag{6.19}$$

où $\widetilde{\rho^u S_L Y_i^{eq-ADF}} = \int_0^1 \rho^u(Z^*)S_L(Z^*)Y_i(\bar{c}^{ADF}=1,Z^*,a)\widetilde{P}(Z^*)dZ^*$. Il reste néanmoins à estimer le taux d'étirement a dans un contexte LES. L'écriture de l'équation (6.19) correspond schématiquement à une combustion prenant la forme d'une flamme triple (voir figure 1.3) en amont de laquelle pourrait se dérouler une auto-inflammation. En aval du front, le modèle impose que la composition chimique soit celle d'une flamme de diffusion turbulente à son état d'équilibre. Ceci revient à modéliser la combustion dans la zone de flamme de diffusion par une chimie infiniment rapide. Cette formulation proposée constitue donc déjà une modélisation pouvant être testée pour des calculs de moteur à injection directe essence. L'actuelle proposition peut néanmoins être améliorée par un modèle intégrant la cinétique de la flamme de diffusion, comme expliqué dans ce qui suit.

6.1.3 Intégration de la combustion en flamme de diffusion

ADF-PCM et indice de flamme

Dans un travail ciblant la modélisation de flammes décrochées turbulentes [40], Domingo *et al.* ont proposé la variable d'avancement suivante, adaptée pour la combustion prémélangée et non prémélangée :

$$c(Z;\underline{x},t) = \frac{Y_{F,o}Z - Y_F(\underline{x},t)}{Y_{F,o}Z - Y_F^{eq}(Z)} \tag{6.20}$$

où $Y_{F,o}$ est la fraction massique de carburant contenue dans un courant et $Y_F^{eq}(Z)$ est la fraction massique de carburant à l'équilibre chimique pour une richesse donnée. A partir de celle-ci, une équation de transport pour la variable d'avancement est dérivée dans le même travail et fait apparaître des termes spécifiques à la combustion partiellement prémélangée :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho c}{\partial t} + \nabla\cdot(\rho \mathbf{u} c) &= \nabla\cdot(\rho D \nabla c) + \dot{\omega}_c \\ &\quad + \left(\frac{2}{Y_{F,o}Z - Y_F^{eq}(Z)}\right)\left(Y_{F,o} - \frac{dY_F^{eq}(Z)}{dZ}\right)\rho\chi_{Z,c} \\ &\quad - \left(\frac{c}{Y_{F,o}Z - Y_F^{eq}(Z)}\right)\frac{d^2Y_F^{eq}(Z)}{dZ^2}\rho\chi_Z\end{aligned} \tag{6.21}$$

Lorsque cette équation est considérée dans le cas particulier de la propagation de flamme, des termes peuvent être éliminés, de même pour la combustion non prémélangée. Afin de ne traiter que les cas limites et d'éviter de résoudre l'équation (6.21) filtrée qui ferait apparaître des contributions peu aisées à fermer, un indice de flamme $\tilde{\xi}_p$ est utilisé afin de déterminer si localement la combustion se déroule en flamme de prémélange ou en flamme

de diffusion, la modélisation spécifique à chacun de ces régimes étant mieux connue. L'indice s'écrit :

$$\tilde{\xi}_p \approx \frac{1}{2}\left(1 - \frac{\tilde{\chi}_{F,o}}{F_{norm}}\right) \tag{6.22}$$

où $\tilde{\chi}_{F,o}$ estime une contribution résolue et une contribution de sous-maille pour le calcul de la quantité filtrée $D\nabla Y_F \cdot \nabla Y_o$ et F_{norm} permet de normaliser $\tilde{\chi}_{F,o}$.

Cet indice prenant la valeur 0 (respectivement 1) si la combustion se produit en régime non prémélangé (respectivement prémélangé), les taux de réaction des espèces chimiques peuvent s'écrire sous la forme :

$$\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} = \tilde{\xi}_p \bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{modeleI} + (1 - \tilde{\xi}_p)\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{diffusion} \tag{6.23}$$

Parmi les modèles cités au chapitre 1 pour la modélisation de la combustion en flamme de diffusion, ADF-PCM a donné de bons résultats récemment [100] et pourrait être exploité pour fermer la contribution $\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{diffusion}$. Dans ce modèle, pratiquement, les taux de réaction des espèces chimiques sont fermés sous la forme :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{ADF-PCM} = \frac{\widetilde{Y}_i(\bar{c}^{ADF-PCM} + d\bar{c}^{ADF-PCM}) - \widetilde{Y}_i}{\tau} \tag{6.24}$$

Cette écriture, combinée à l'équation (6.23) peut poser un problème de cohérence puisque rien ne garantit qu'un produit de combustion comme CO_2 suive une évolution monotone au cours du temps. En effet, le taux de réaction de la flamme de prémélange impose une évolution monotone de la composition chimique d'un état "gaz frais" vers un état "gaz brûlés" tandis que pour la flamme de diffusion, le taux de réaction de l'équation (6.24) correspond à une relaxation de la composition locale vers la composition de la table à un avancement $\bar{c}^{ADF-PCM}$. Dans le cas de l'espèce CO_2, il n'est pas garanti que sa fraction massique locale n'est pas inférieure à la fraction massique à $\bar{c}^{ADF-PCM}$, puisque cette espèce peut être produite par la flamme de prémélange. Par conséquent, l'équation (6.24) va entraîner une consommation non physique de cette espèce. Une alternative pour la modélisation de la flamme de diffusion serait de résoudre comme dans ADF-PCM l'équation de transport de $\widetilde{Y}_c^{ADF-PCM}$, de sorte à pouvoir estimer l'avancement $\bar{c}^{ADF-PCM}$ et d'estimer le taux de réaction des espèces chimiques comme :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i}^{diffusion} = \frac{\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}^{ADF-PCM}(\bar{c}^{ADF-PCM})}{\widetilde{Y}_c(\bar{c}^{ADF-PCM} = 1, a)}(\widetilde{Y}_i^{eq-ADF} - \widetilde{Y}_i^u) \tag{6.25}$$

Cette formulation correspond dans le principe aux modèles adoptés par les modèles génériques adaptés aux cas moteurs pour traiter la flamme de diffusion (voir chapitre 1). Par rapport à ces modélisations, la différence est l'estimation précise du temps caractéristique ($\tau = 1/\widetilde{\dot{\omega}}_c^{ADF-PCM}$). De plus, la composition chimique finale tient compte des effets diffusifs de la flammelette. L'équation (6.25) correspond néanmoins à une approximation de la flamme de diffusion turbulente puisque la prédiction de la chimie intermédiaire sera erronée, particulièrement pour les espèces chimiques dont la variation est non monotone.

En résumé, les taux de réaction globaux pour les espèces chimiques prendraient donc

la forme :

$$\begin{aligned}\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} &= \tilde{\xi}_p((1-\bar{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}_c^{TKI-ADF}(c^{AI-TKI})(\widetilde{Y}_i^{eq-ADF}-\widetilde{Y}_i^u) \\ &+\overline{\Sigma}_{\tilde{c}}(\rho^u\widetilde{S_L Y_i^{eq-ADF}}-\rho^u\widetilde{S_L Y_i^u})) \\ &+(1-\tilde{\xi}_p)\frac{\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_c}^{ADF-PCM}(\bar{c}^{ADF-PCM})}{\widetilde{Y}_c(\bar{c}^{ADF-PCM}=1,a)}(\widetilde{Y}_i^{eq-ADF}-\widetilde{Y}_i^u) \end{aligned} \tag{6.26}$$

Un modèle générique a ainsi été proposé permettant de combiner des modèles spécifiques à la cinétique de chaque mode de combustion. Néanmoins, la composition chimique intermédiaire entre l'état initial et l'état final est approximée, ce qui peut *a priori* poser problème pour la prédiction des espèces chimiques lors de la modélisation de combustions lentes, comme la flamme de diffusion. Cette proposition pourrait être testée par la simulation de flammes décrochées qui présentent une zone de stabilisation par propagation d'un front de flamme ou auto-inflammation en milieu stratifié en aval de laquelle se produit une combustion par flamme de diffusion.

6.2 Application d'une pdf en fraction de mélange pour le modèle II

Pour rappel, la fermeture proposée précédemment pour le modèle II de sorte qu'il puisse modéliser l'AI et la flamme de prémélange s'écrit :

$$\begin{aligned}\widetilde{\dot{\omega}}_{Y_i} &= \alpha\frac{\widetilde{Y}_i^{AI}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI})-\widetilde{Y}_i}{\gamma\delta_t} \\ &+(1-\alpha)\frac{\widetilde{Y}_i^{AI}(\tilde{c}+\gamma\delta_t\widetilde{\dot{\omega}}_c^{PF})-\widetilde{Y}_i}{\gamma\delta_t}\end{aligned} \tag{6.27}$$

Les taux de réaction sont clos de façon identique à l'équation (6.1) tout en conservant l'approximation $\overline{P}(c^*|Z^*) \approx \overline{P}(c^*)$. La prise en compte de la pdf en fraction de mélange implique que la ségrégation en avancement pour la combustion en AI s'écrive désormais [156] :

$$S_c^{AI} = Y_{cv}^{AI}\left(\frac{\widetilde{Y}_c^{eq\ 2}}{\widetilde{Y_c^{eq2}}}+\widetilde{Y}_c^{AI\ 2}\left(\frac{\widetilde{Y}_c^{eq\ 2}}{\widetilde{Y_c^{eq2}}}-1\right)\right) / \ \widetilde{Y}_c^{AI}(\widetilde{Y}_c^{eq}-\widetilde{Y}_c^{AI}) \tag{6.28}$$

où :

$$\widetilde{Y}_c^{eq} = \int_0^1 Y_c^{eq}(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \tag{6.29}$$

$$\widetilde{Y_c^{eq2}} = \int_0^1 Y_c^{eq2}(Z^*)\widetilde{P}(Z^*)dZ^* \tag{6.30}$$

$$\tag{6.31}$$

Le scalaire $\widetilde{Y}_i^{AI}$ est maintenant fermé comme :

$$\widetilde{Y}_i^{AI} = \int_0^1\int_0^1 Y_i^{AI}(Z^*,c^*)\overline{P}(c^*)\widetilde{P}(Z^*)dc^*dZ^* \tag{6.32}$$

D'autre part, les taux de réaction en avancement sont également modifiés suivant :

$$\widetilde{\dot{\omega}}_c^{PF} = \overline{\Sigma} \int_0^1 \rho^u(Z^*) S_L(Z^*) \widetilde{P}(Z^*) dZ^* \tag{6.33}$$

$$\widetilde{\dot{\omega}}_c^{AI} = \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}_{Y_c}^{AI}(Z^*, c^*) \overline{P}(c^*) \widetilde{P}(Z^*) dc^* dZ^* / \widetilde{Y}_c^{eq} \tag{6.34}$$

La modélisation proposée peut donc rendre compte de l'auto-inflammation en milieu hétérogène turbulent de façon identique au travail de Galpin [58], de la propagation de flamme dans les mêmes conditions et *a priori* de la transition entre ces deux modes de combustion. Concernant la modélisation de la flamme de diffusion instationnaire, celle-ci est en revanche largement limitée, puisque les taux de réaction laminaires utilisés proviennent de la solution de l'équation de flammelette pour laquelle le terme diffusif est omis. Une alternative serait alors de tabuler des flammes laminaires prémélangées 1D comme cela est fait classiquement pour une modélisation PCM-FPI de flammes turbulentes partiellement prémélangées. Néanmoins, le calcul de flammes 1D pour les hydrocarbures lourds exploités lors de calculs moteur comme l'iso-octane ou le n-heptane pourrait s'avérer pénalisant en terme de temps de calcul requis.

6.3 Conclusion

Ce chapitre a permis de présenter des propositions d'extensions théoriques des modèles I et II pour la modélisation de la combustion en milieu stratifié en richesse.
Concernant le modèle I, une pdf en fraction de mélange a tout d'abord été appliquée au taux de réaction global. Le taux de réaction pour la partie auto-inflammation a été modifié de sorte a intégrer un résultat issu de travaux récents à savoir l'intérêt de la prise en compte du terme diffusif de l'équation de flammelette. La notion d'indice de flamme a également permis d'intégrer une chimie non infiniment rapide lors de la modélisation de la flamme de diffusion en milieu turbulent. Un modèle à même de traiter théoriquement tous les modes de combustion a ainsi été proposé. Néanmoins quelques limitations sont à souligner comme l'approximation de l'évolution de la chimie au cours de la combustion, écrite ici comme la conversion d'un état "gaz frais" en un état d'équilibre de la chimie.
Le modèle II prend également en compte les effets de stratification de richesse en sous-maille *via* l'utilisation d'une pdf en fraction de mélange. Bien que ce modèle rende compte de façon plus détaillée de la chimie pour les modes de combustion traités (flamme de prémélange et auto-inflammation), il est plus délicat de lui adjoindre un modèle de flamme de diffusion exploitable dans un contexte moteur. En effet, le modèle classique PCM-FPI repose sur le calcul de flammes prémélangées 1D qui peut être très long pour les carburants utilisés dans les moteurs automobiles.

D'autre part, une problématique à tous les modèles évoqués subsiste actuellement. Comme cela a été évoqué préalablement, l'utilisation de la tabulation FPI pour le calcul moteur soulève actuellement quelques problèmes (les hypothèses de pression ou volume constant pour les calculs des réacteurs homogènes sont particulièrement abusives pour le rendu de la cinétique chimique lors de la phase de détente). Des travaux de développement sont actuellement en cours pour lever cette limitation. Cependant, ceci n'empêche pas le test des formalismes théoriques proposés dans ce chapitre sur des configurations académiques.

Chapitre 7

Simulations de cas moteur

Le but de ce chapitre est de démontrer la fonctionnalité et le potentiel des modèles couplés proposés préalablement et associés à la LES pour l'étude des combustions anormales. Seul le modèle I a été exploité dans ce chapitre pour des questions de temps. Par ailleurs, les résultats donnés par le modèle II auraient fourni des dégagements de chaleur identiques mais des compositions chimiques différentes, celles-ci étant sans objet ici. Signalons dès maintenant qu'il s'agit d'un travail prospectif qualitatif présentant quelques limitations et qu'il n'y aura pas de comparaisons directes avec des résultats expérimentaux.
Pour cette étude, des calculs moteur du type allumage commandé sont réalisés sur une partie de cycle seulement. En effet, afin d'optimiser les temps dédiés aux simulations, les solutions de précédents calculs des phases d'admission et de début de compression ont été reprises pour obtenir des solutions initiales.
La configuration simulée ainsi que les spécificités des calculs menés sont tout d'abord expliqués et les résultats obtenus sont ensuite présentés.

7.1 Cas test

7.1.1 Configuration

La configuration choisie ici est un moteur monocylindre IFP, d'une cylindrée de 500 cm^3. Des calculs multi-cycles ont déjà été réalisés pour ce moteur [134, 153] et il apparaît donc judicieux de conserver la même configuration, les divers maillages requis et outils numériques spécifiques étant déjà disponibles.
Comme cela est illustré par la figure 7.1, le cylindre comporte 4 soupapes, les 2 premières régulant l'admission du mélange air/essence et les deux autres l'échappement des gaz brûlés à l'issue du cycle.
Plusieurs points de fonctionnement sont investigués par la suite sur ce moteur, les caractéristiques communes sont renseignées au tableau 7.1.

7.1.2 Initialisation et conditions aux limites

L'initialisation des calculs consiste à reprendre une solution issue d'un calcul d'admission réalisé à l'IFP en tenant compte des lois de soupapes et du rendement volumétrique du

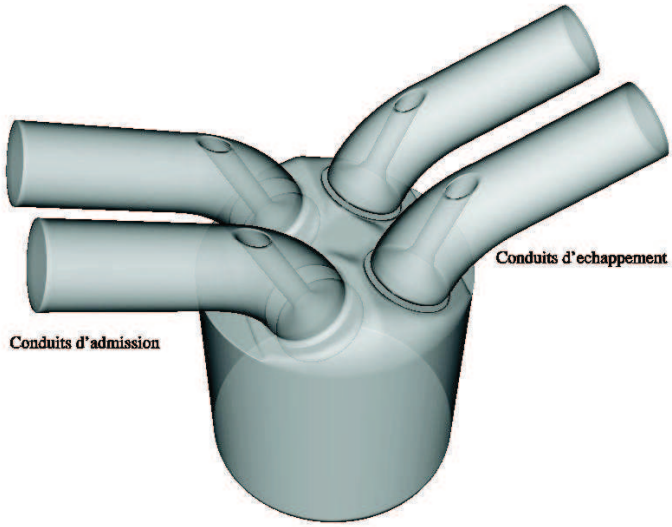


FIG. 7.1 – Domaine de calcul pour le moteur monocylindre IFP.

Alesage x Course	86 mm x 86 mm
Taux de compression	10
Régime moteur (tr/min)	2000
Richesse	1 (air/n-heptane)
Rendement volumétrique	0.35
Ouverture admission	-355 $deg.$
Fermeture admission	-123 $deg.$

TAB. 7.1 – Caractéristiques communes aux points de fonctionnement considérés. Les angles vilebrequin sont exprimés par rapport au point mort haut combustion.

Zone	Entrée cond. admission	Paroi cond. admission	Surface soupape	Paroi culasse	Paroi cylindre	Surface piston
Cond. limites	Entrée/sortie non réfléch.	Loi log. isotherme	Loi log. isotherme	Loi log. isotherme	Loi log. isotherme	Loi log. isotherme
P_e	$P_{exp}(t)$	-	-	-	-	-
T_e	$304K$	$450K$	$450K$	$450K$	$450K$	$500K$

Tab. 7.2 – Conditions aux limites.

tableau 7.1 et à y intégrer les variables fictives requises par le modèle de combustion. Les conditions aux limites utilisées sont résumées dans le tableau 7.2.

Les parois du domaine sont toutes supposées isothermes et la loi de paroi impose une évolution logarithmique pour la vitesse et la température. Au niveau de l'admission, une condition limite spécifique permet également la sortie des gaz pour intégrer le phénomène de $backflow$ qui se produit lors de l'admission et qui affecte le remplissage du cylindre. A l'ouverture de la soupape d'admission, juste avant la descente du piston, les gaz brûlés encore contenus dans la chambre de combustion ont une pression supérieure aux gaz frais remplissant la tubulure d'admission. Ces derniers vont alors être refoulés avant l'admission forcée par la descente du piston. La pression d'admission imposée correspond à l'évolution de la pression expérimentale moyenne, établie à partir de 300 cycles.

7.1.3 Maillage mobile

Une des spécificités du calcul moteur est l'évolution du maillage au cours du cycle du fait de la mobilité du piston et des soupapes. La méthode ALE (*Arbitrary Lagrangian-Eulerian*, [71]) a été implantée dans le solveur AVBP afin de gérer les variations de maillage. Chaque noeud possède une vitesse d'évolution propre et sa position doit donc être déterminée à chaque instant. Pour ce faire, la méthode ITC [48] est utilisée pour interpoler cette position à partir d'un maillage initial et d'un maillage final de mêmes connectivités. Afin de contrôler l'évolution des mailles et de limiter leurs déformations lors du calcul du cycle moteur, celui-ci est divisé en phases. A chaque phase correspondent un maillage initial et un maillage final générés par l'utilisateur. A la fin d'une phase, les champs des variables sont interpolés du maillage final vers le maillage initial de la phase suivante. L'ensemble de la méthode est résumé par la figure 7.2.
Le maillage comporte environ 600 000 noeuds au point mort bas et 300 000 au point mort haut. La taille caractéristique d'une maille est 0.5 mm. Un maillage utilisé lors de la phase d'admission est visible sur la figure 7.3.

7.1.4 Modèle de combustion et table chimique

Le modèle de combustion utilisé dans ce chapitre est le modèle I, du fait de sa simplicité, du faible nombre d'informations à interpoler et d'une transition naturelle d'un mode de combustion à l'autre. Une table TKI est alors requise. Celle-ci correspond à la table utilisée dans le chapitre précédent pour les tests de fonctionnalité des modèles étendus.

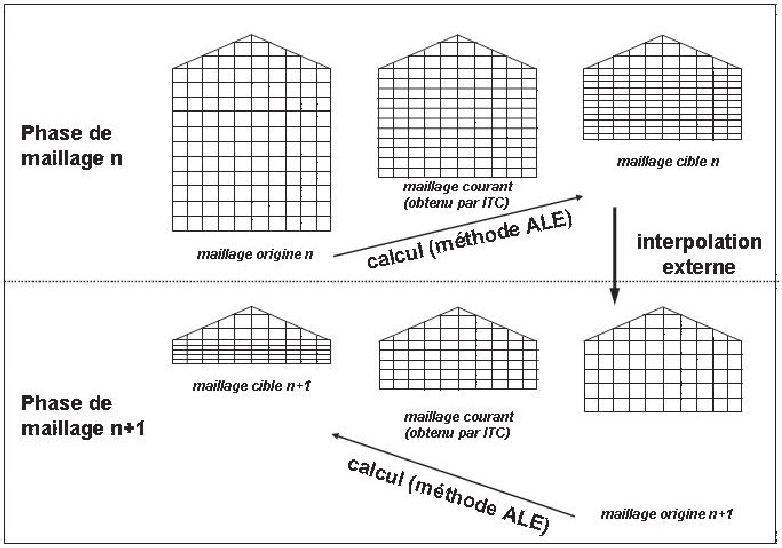


FIG. 7.2 – Principe de la méthode ALE, dédiée à la gestion des maillages en calcul moteur. Tiré de [133].

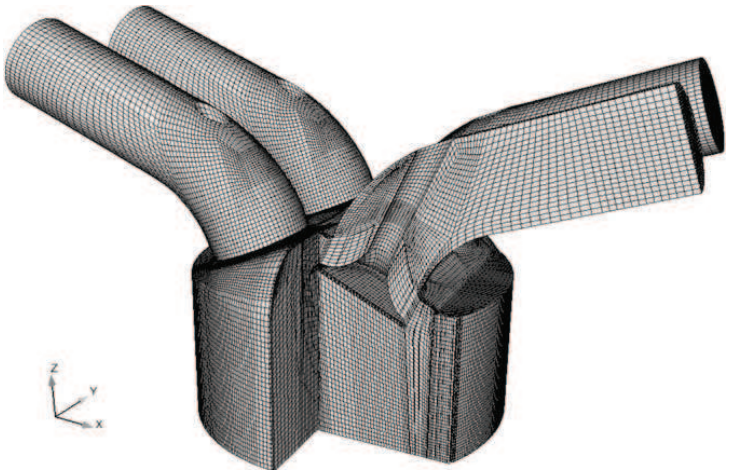


FIG. 7.3 – Maillage du domaine de calcul 70 *deg.* après ouverture des soupapes d'admission.

7.1.5 Points de fonctionnement étudiés et phénoménologie

Les résultats présentés dans la suite correspondent à des simulations réalisées entre -60 $deg.$ et 60 $deg.$, le but de notre étude étant de nous focaliser sur la combustion.
Partant d'un point à faible charge (rendement volumétrique de 0.35 environ) et faible régime (2000 tr/min), des modifications ont été réalisées de sorte à retrouver des phénomènes reliés au cliquetis et au pré-allumage.
Le cliquetis correspond à une auto-inflammation se produisant lors de la propagation de flamme au niveau des gaz frais restant à consommer. Cette combustion brutale peut occasionner des dégâts mécaniques (joint de culasse, segmentation, piston, soupapes, ...) encore aggravés si elle se produit tôt dans la phase de compression. Le cliquetis apparaît d'autant plus facilement que l'avance à l'allumage est importante, les conditions thermodynamiques étant alors plus sévères puisque la combustion se produit pendant la phase de compression et les gaz frais ont une fenêtre temporelle plus étendue pour s'auto-inflammer avant leur consommation par la flamme de prémélange. Plusieurs calculs ont été réalisés, chacun étant caractérisé par une valeur d'avance à l'allumage.
Le pré-allumage se produit pour des points de fonctionnement à faible régime et forte charge mais son apparition reste sporadique et difficile à prédire. Les calculs LES pourraient fournir un complément de compréhension aux expérimentateurs de par la prise en compte du caractère instationnaire des écoulements dans les moteurs et de leur bon niveau de résolution spatiale. Dans le déroulement du pré-allumage, une auto-inflammation locale peut se produire avant l'allumage par bougie, suivie par une propagation de flamme et une auto-inflammation en masse du mélange de gaz frais restant soit une combustion très violente. Une seule apparition de ce phénomène peut ainsi suffire à endommager sérieusement le moteur. Pour provoquer le pré-allumage dans nos simulations, un point chaud est déposé de sorte à encourager localement la réaction d'auto-inflammation.
Quelques limitations associées aux simulations sont néanmoins à garder à l'esprit :

- le carburant considéré ici est le n-heptane. L'indice d'octane traduit la capacité d'un carburant à resister à l'auto-inflammation (100 pour l'iso-octane, 0 pour le n-heptane). Sachant que les carburants essence ont un indice d'octane voisin de 95, il est directement perceptible que le n-heptane est peu représentatif de l'essence. Néanmoins les méthodes de tabulation pour le n-heptane sont bien connues et ses propriétés d'auto-inflammation permettront d'obtenir aisément des combustions anormales lors des simulations ;

- l'initialisation du précurseur d'auto-inflammation se fait à -60 $deg.$ tandis que celle-ci devrait être réalisée plus tôt (fin de l'admission) ;

- la reproduction des phénomènes associés au pré-allumage est réalisée sur des points de faible charge.

7.2 Résultats

7.2.1 Cliquetis

Les calculs ont été réalisés pour les avances à l'allumage suivantes : 40 *deg.*, 36 *deg.*, 33 *deg.*, 30 *deg.* et 20 *deg.* L'impact de cette variation paramétrique est tout d'abord mis en avant par la visualisation de la pression cylindre. La figure 7.5 représente ainsi pour chaque avance, l'évolution d'une pression fournie par un capteur de pression placé entre les soupapes d'échappement et la zone de chasse (Fig. 7.4).

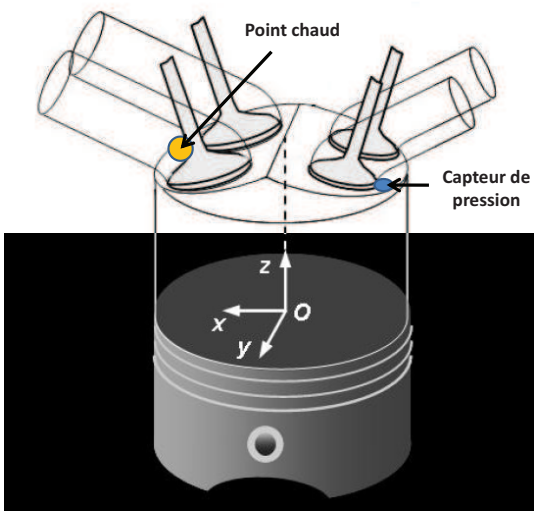


FIG. 7.4 – Localisation du capteur de pression (x = -29 mm, y = 19 mm, z = 90 mm) et du point chaud initié pour l'étude des cas de pré-allumage (x = 23 mm, y = 0 mm, z = 91 mm).

La production du cliquetis pour des avances à l'allumage comprises entre 40 *deg.* et 33 *deg.* est clairement mise en avant par une brusque montée en pression suivie par des oscillations qui représentent la propagation d'ondes acoustiques dans la chambre de combustion. Il est ici vérifié que l'apparition du cliquetis peut être repoussée voire éliminée (cas à 20 *deg.* d'avance) par un jeu sur l'avance à l'allumage, comme cela est utilisé en contrôle moteur.

Les signaux expérimentaux de la figure 7.6 ont une allure très semblable aux signaux de pression obtenus par le calcul pour des avances à l'allumage de 33 *deg.* et 40 *deg.* : les premières oscillations ont des amplitudes très importantes (jusqu'à 80 *bars* dans l'expérience et jusqu'à 40 *bars* dans nos calculs, sachant néanmoins que pour ces derniers, les pics des courbes de pression sont moins élevés) puis la fréquence et l'amplitude des oscillations décroissent à chaque fois au cours de la détente. Pour une avance à l'allumage de 40 *deg.*, le signal de pression au cours de la détente a été traité par un filtre passe-bas (de fréquence de coupure égale à 12 kHz) puis a subi une transformation de Fourier pour finalement faire ressortir un mode préférentiel de fréquence 5.7 kHz. Cette valeur est bien située dans la gamme des fréquences (5-10 kHz) rencontrées lors de la

détente en cas de cliquetis [69].

Les taux de réaction correspondant à l'auto-inflammation et à la propagation de flamme étant clairement distingués dans le modèle I étendu, il est possible de mettre en avant leur impact sur l'évolution de la pression cylindre. Ainsi sont évaluées les quantités :

$$I_{propa} = \int_V \rho^u S_L \overline{\Sigma}_{\tilde{c}} dV \tag{7.1}$$

$$I_{AI} = \int_V (1-\tilde{c})\bar{\rho}\widetilde{\dot{\omega}}^{TKI}(c^{TKI})dV \tag{7.2}$$

L'évolution de ces intégrales est tracée sur la figure 7.7 pour les avances à l'allumage de 40 *deg.*, 36 *deg.*, 33 *deg.* et 30 *deg.* L'intégrale du taux de réaction lié à l'auto-inflammation est d'autant plus grande que cette réaction se produit tôt, car la quantité de carburant restant à consommer est plus importante. Ceci permet d'expliquer les monteés en pression brutales pour les avances à l'allumage comprises entre 40 *deg.* et 33 *deg.* Il est également notable que bien que la courbe de pression pour une avance de 30 *deg.* ne présente à première vue aucun cliquetis, un cliquetis naissant existe tout de même comme le montre le pic d'auto-inflammation vers 32 *deg.*

Enfin, pour le cas d'une avance à l'allumage de 40 *deg.*, l'évolution qualitative de la modélisation du phénomène de cliquetis est détaillée par les figures 7.8 à 7.13 au travers des représentations de la variable d'avancement, de l'avancement spécifique à l'auto-inflammation (soit la fraction massique de carburant auto-inflammé sur la fraction massique de carburant contenu dans les gaz frais), de la densité de surface de flamme et de la pression.
Peu après le point mort haut combustion (Fig. 7.8) le champ de densité de surface de flamme matérialise le front de flamme en aval duquel se trouvent les gaz brûlés ($\tilde{c} = 1$). La fraction massique de carburant consommé par auto-inflammation normalisée est non nulle mais très faible, traduisant le départ de l'auto-inflammation dans la région du front de flamme. Les figures 7.9 et 7.10 illustrent l'augmentation rapide de la quantité de carburant consommé en auto-inflammation tant au niveau du front de flamme qu'au niveau de la paroi du cylindre où la pression tend à augmenter localement, réduisant les délais caractéristiques d'auto-inflammation. Avec cette combustion, des poches de gaz brûlés apparaissent ce qui correspond à la formation de gradients de $\tilde{c}$, soit physiquement à la création de densité de surface de flamme. Ainsi, bien que la combustion en périphérie du front principal se déroule essentiellement en auto-inflammation, une partie est également due à la présence d'une densité de surface de flamme. A partir de 2 *deg.*, la combustion des gaz frais s'achève (la variable d'avancement $\tilde{c}$ tend vers 1) et la densité de surface de flamme disparaît. La quantité de carburant consommé par auto-inflammation n'atteint jamais la valeur de la fraction massique de carburant contenue dans les gaz frais, ce qui montre bien que la propagation de flamme a toujours complété ce mode de combustion. Les hétérogénéités de pression dans la chambre matérialisent la propagation d'ondes acoustiques de forte amplitude mises en avant sur la figure 7.5.

Finalement, il a été possible de rendre compte d'une phénoménologie très proche du cliquetis à travers l'utilisation du modèle I étendu sur une configuration réaliste. Les signaux

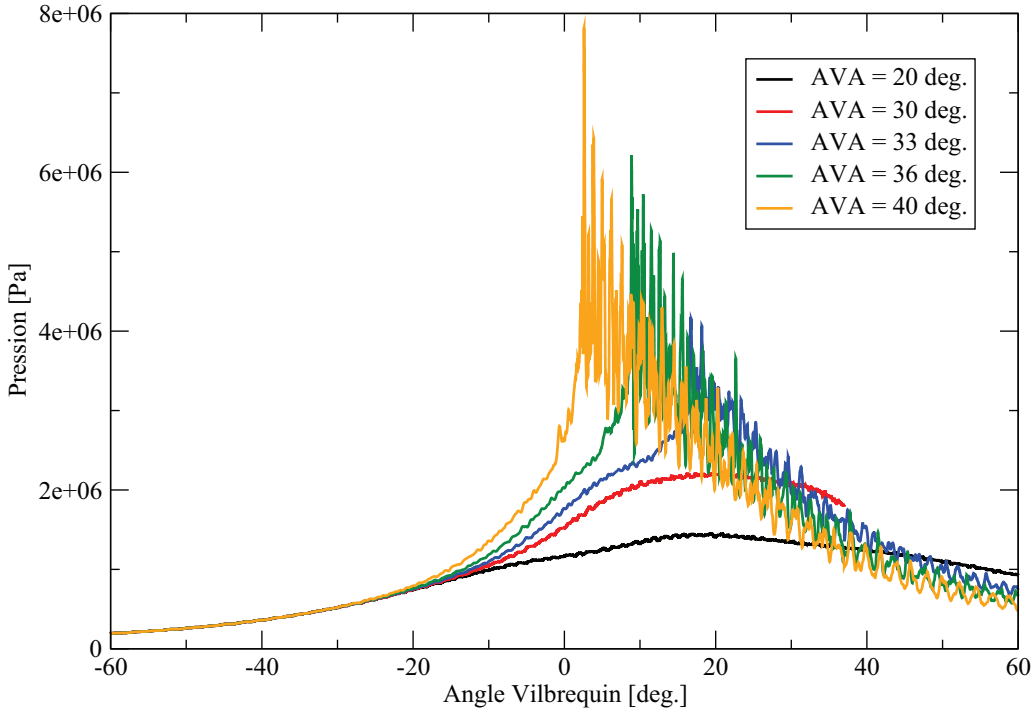


FIG. 7.5 – Evolution temporelle de la pression locale en fonction du choix d'avance à l'allumage.

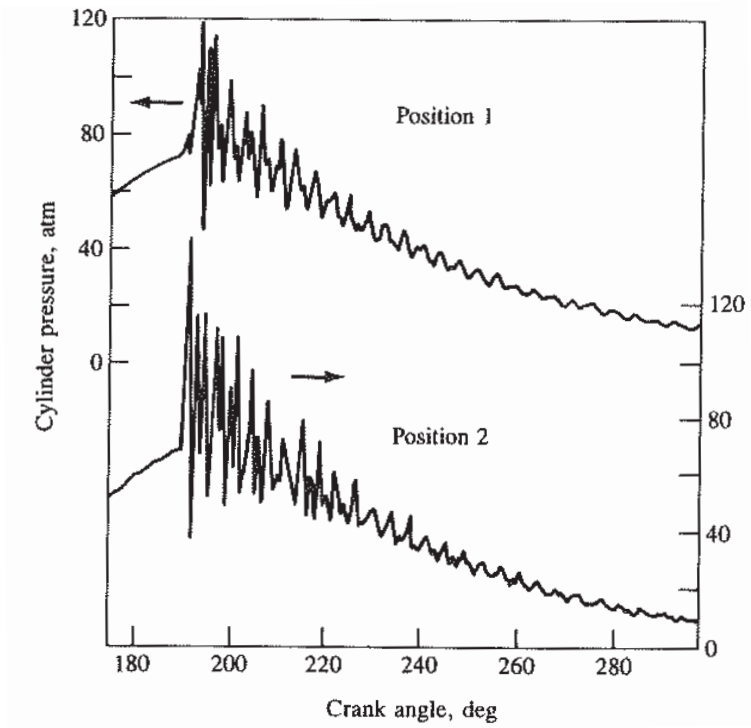


FIG. 7.6 – Signaux de pression captés aux côtés opposés d'une chambre de combustion d'un moteur à allumage commandé pour un cycle présentant un cliquetis important. Position 1 : au sommet du cylindre, près de la bougie. Position 2 : au sommet du cylindre, au plus loin de la bougie. Régime moteur : 2000 tr/min, ouverture maximale du papillon. Source : [69].

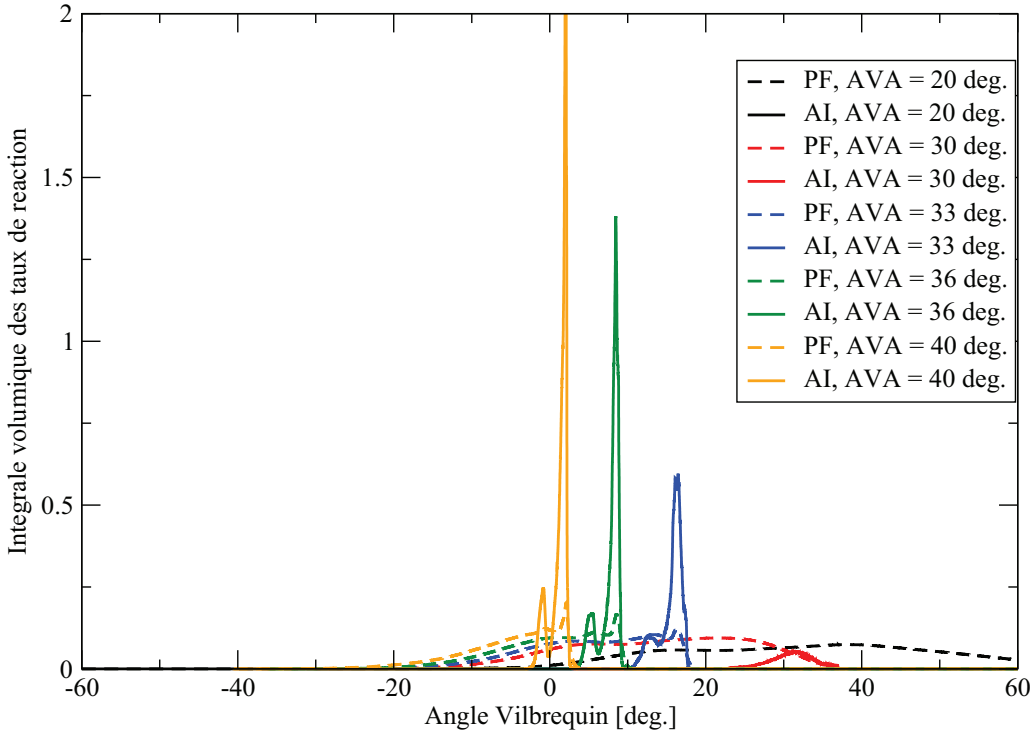


FIG. 7.7 – Evolution temporelle des intégrales volumiques des taux de réaction dédiés à la propagation de flamme et à l'auto-inflammation en fonction de l'avance à l'allumage.

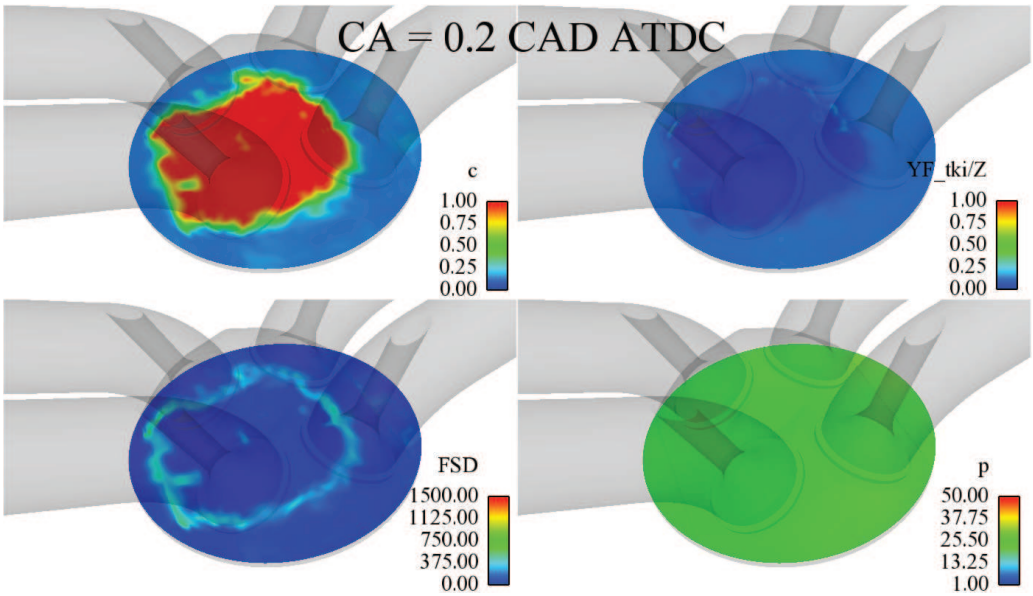


FIG. 7.8 – Angle Vilebrequin = 0.2 *deg*. AVA = 40 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

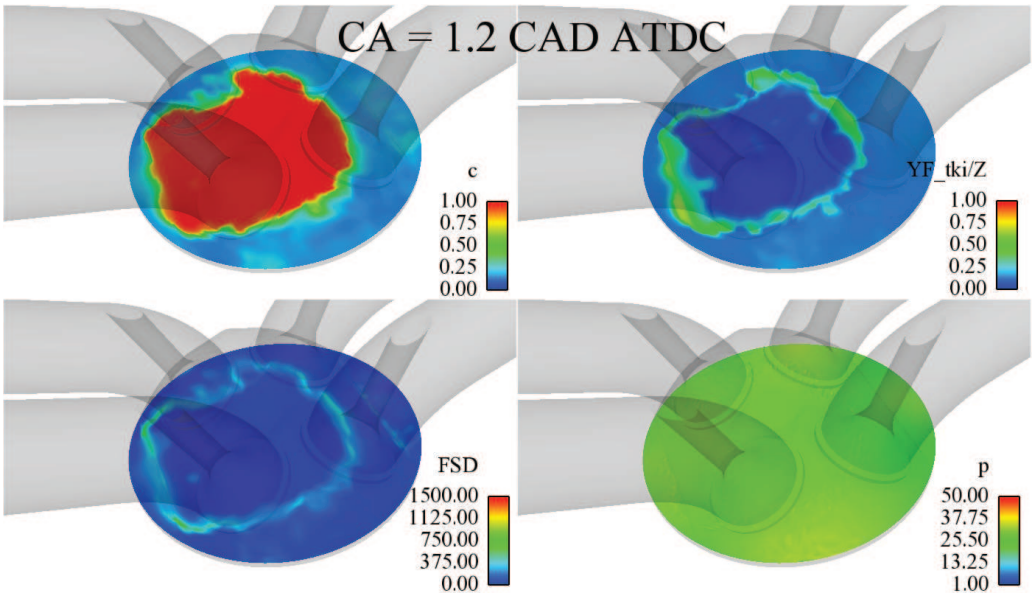


FIG. 7.9 – Angle Vilebrequin = 1.2 *deg*. AVA = 40 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

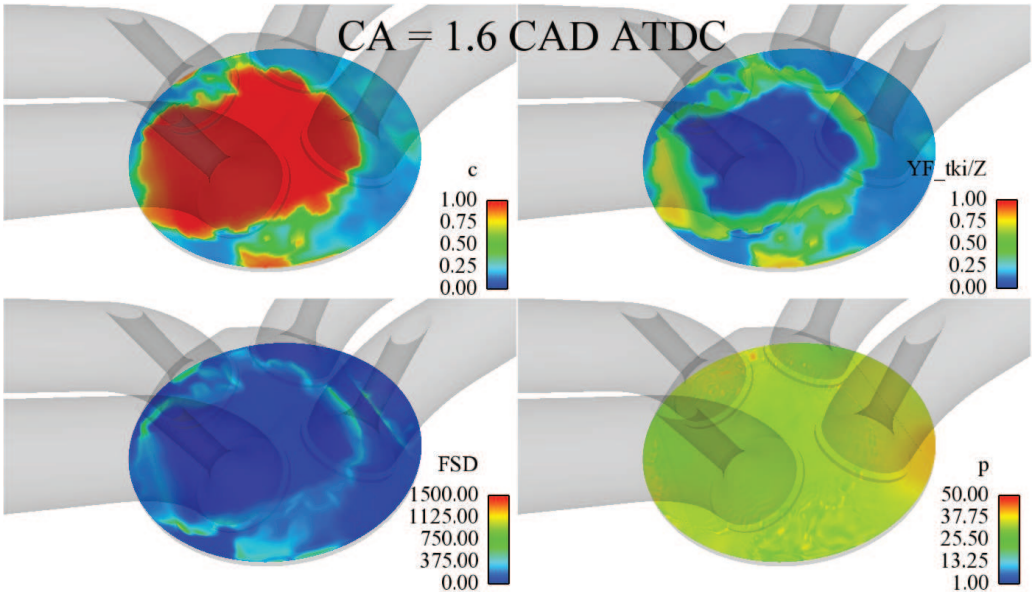


FIG. 7.10 – Angle Vilebrequin = 1.6 *deg*. AVA = 40 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

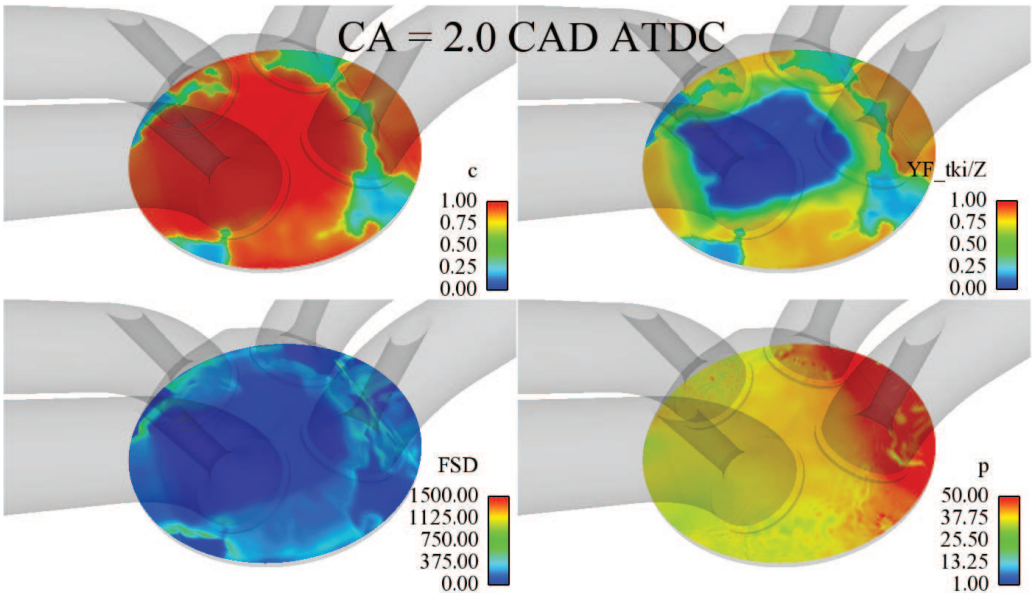


FIG. 7.11 – Angle Vilebrequin = 2.0 *deg*. AVA = 40 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

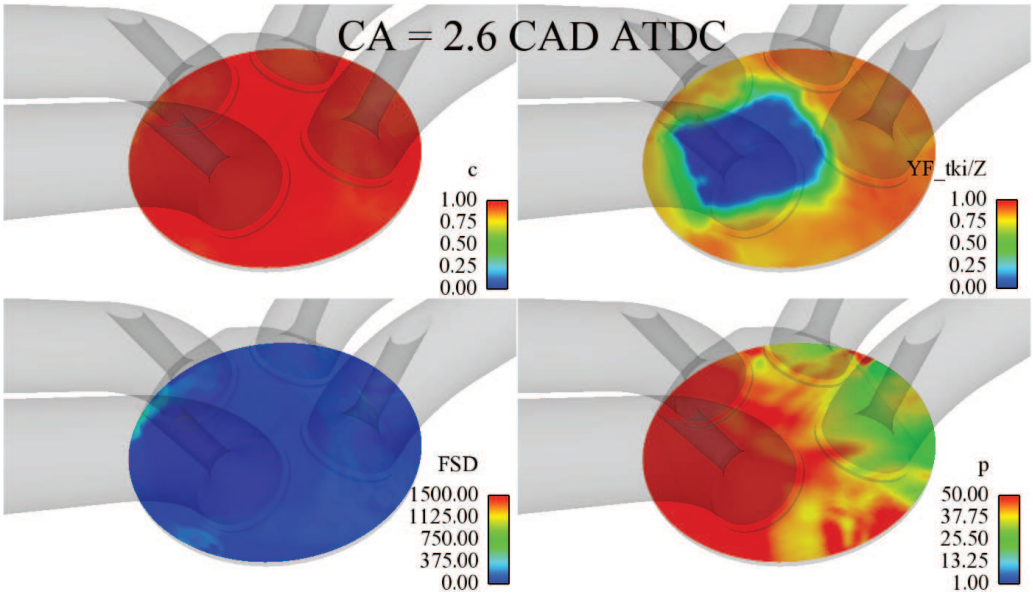


FIG. 7.12 – Angle Vilebrequin = 2.6 *deg*. AVA = 40 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

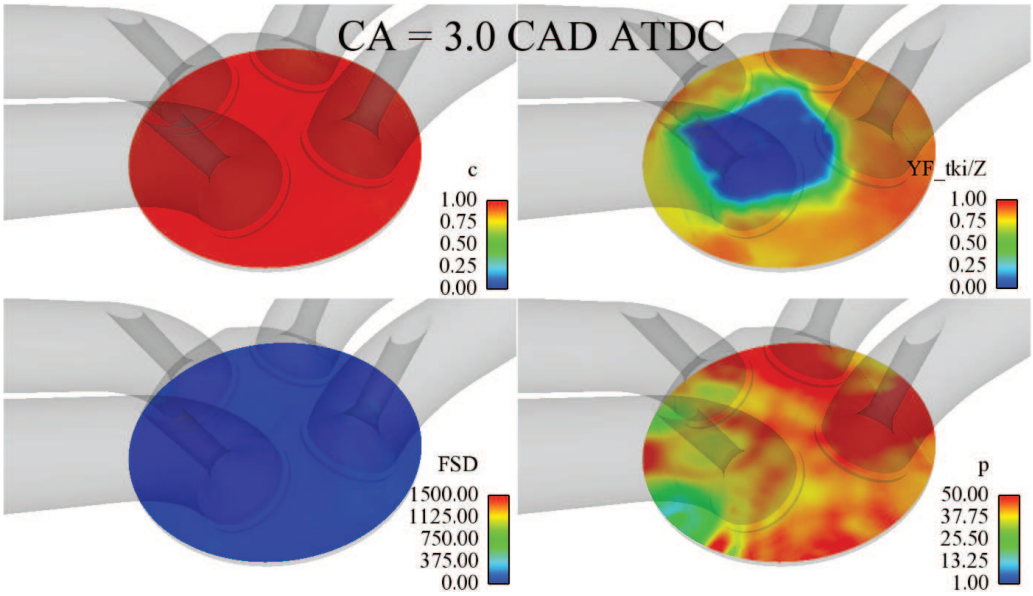


FIG. 7.13 – Angle Vilebrequin = 2.6 *deg*. AVA = 40 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

temporels de pression obtenus après départ de l'auto-inflammation ont une affinité qualitative avec des signaux expérimentaux et l'effet de l'avance à l'allumage sur l'apparition du cliquetis a été vérifié.

7.2.2 Pré-allumage

Dans cette partie, le but a été de reproduire la phénoménologie du pré-allumage bien que le point de fonctionnement corresponde à une faible charge. L'auto-inflammation locale est favorisée par dépôt d'un point chaud de 1 *cm* de diamètre à proximité des soupapes d'admission comme représenté sur la figure 7.4. Ce choix de localisation n'est pas pertinent du point de vue du motoriste, le point chaud devant plutôt se situer du côté de l'échappement, plus chaud. Néanmoins, de premiers calculs ont montré que la surface de flamme initiée par le bougie était convectée par la turbulence de la chambre vers l'échappement, aussi les gaz frais de cette zone étaient consommés par la propagation de flamme avant l'auto-inflammation naissante, ne permettant pas de reproduire un phénomène de pré-allumage numériquement. Ce point chaud est modélisé par un différentiel positif de ΔT^u par rapport à la température de gaz frais évaluée à partir de l'équation de transport de l'enthalpie des gaz frais. Deux valeurs ont été adoptées pour ce différentiel : 200 K et 500 K.

Cas $\Delta T^u = 200\ K$

De la même façon que pour le cliquetis, les évolutions de la pression cylindre et des contributions de l'auto-inflammation et de la flamme de prémélange sont illustrées par les figures 7.14 et 7.15. Il est tout d'abord remarquable que la présence du point chaud conduit à une augmentation sensible de la pression cylindre par rapport à un cas de même avance. D'autre part, une avance à l'allumage plus importante mais sans initiation

de point chaud (ici 33 *deg.*) permet de retrouver une évolution de pression très proche du cas avec point chaud. Ceci présente l'intérêt d'avoir déjà été mis en avant par l'expérience à l'IFP.

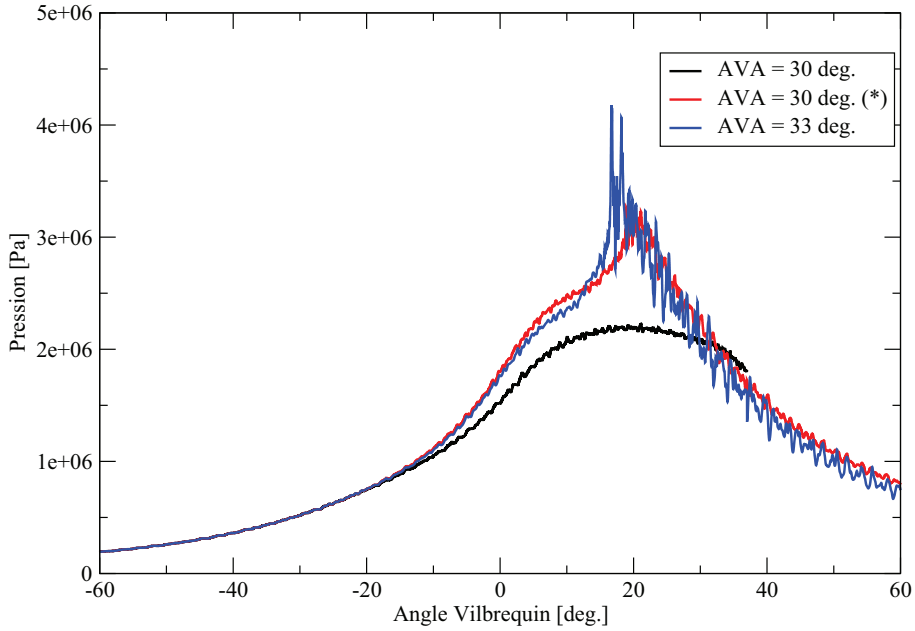


FIG. 7.14 – Evolution de la pression cylindre pour des avances à l'allumage de 30 *deg.* et 33 *deg.* L'étoile indique la présence d'un point chaud pour le cas considéré.

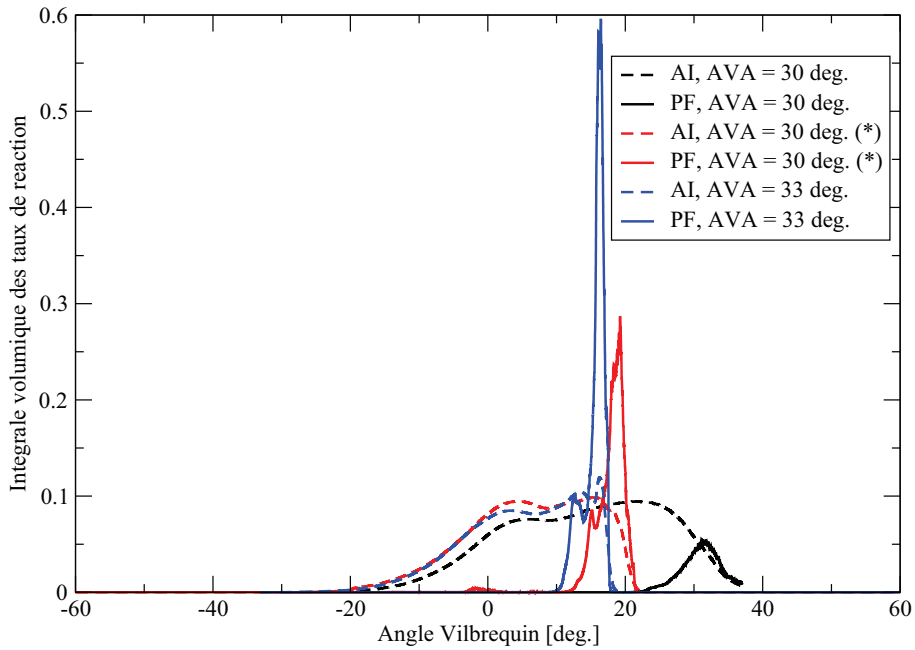


FIG. 7.15 – Evolution temporelle des intégrales volumiques des taux de réaction dédiés à la propagation de flamme et à l'auto-inflammation en fonction de l'avance à l'allumage. L'étoile indique la présence d'un point chaud pour le cas considéré.

La figure 7.15 montre bien que le point chaud entraîne une auto-inflammation très lo-

calisée vers 0 *deg.*, une dominante de combustion par propagation de flamme et enfin une auto-inflammation en masse des gaz frais restants dans la chambre. D'autre part, la ressemblance des courbes de pression pour une avance à l'allumage de 33 *deg.* et une avance de 30 *deg.* accompagnée par un point chaud est expliquée par un phasage proche des départs en auto-inflammation. L'auto-inflammation partant plus tôt pour une avance de 33 *deg.*, elle est plus violente, soit un pic de pression et des oscillations de pression de plus grandes amplitudes.

Le déroulement qualitatif de la combustion est expliqué par les figures 7.16 à 7.20. Sur la figure 7.16, deux zones de combustion par propagation d'un front de flamme peuvent être identifiées : une zone principale, de plus grande taille correspondant à la combustion initiée par la bougie et une zone plus petite, centrée sur une valeur non nulle de carburant consommé par auto-inflammation, à proximité du point chaud. Les figures 7.17 et 7.18 montrent la propagation de la densité de surface de flamme vers les gaz frais et la compression de ces derniers. Ceci se traduit par l'augmentation rapide de la fraction massique de carburant consommé par auto-inflammation en périphérie du front de flamme. De même que pour le cas du cliquetis, sur les figures 7.19 et 7.20, de la densité de surface de flamme se créé dans les zones où l'auto-inflammation est suffisamment avancée et concourt à la consommation des gaz frais restants dans la chambre.
De fortes hétérogénéités en pression sont également générées dans la chambre par la combustion brutale.

Cas $\Delta T^u = 500\ K$

Un autre cas est réalisé pour lequel le différentiel de température est éxagérément plus important afin de déclencher une auto-inflammation avant l'allumage. De plus, l'avance à l'allumage est réduite à 10 *deg.*
La figure 7.21 montre ainsi que l'auto-inflammation est déclenchée avant l'allumage et que celle-ci s'arrête très vite (en 3 *deg.* environ). A partir de cette initiation, une flamme de prémélange se développe et se propage. Le signal de pression est ainsi très faiblement bruité, la combustion se déroulant essentiellement du fait de la propagation de flamme (Fig. 7.22).

Ces affirmations peuvent être vérifiées à partir des évolutions temporelles des champs d'avancement, de densité de surface de flamme et d'avancement spécifique à l'auto-inflammation. En effet, 11 *deg.* avant le point mort haut, l'auto-inflammation a déjà démarré, consommant ainsi des gaz frais et initiant un champ de densité de surface de flamme. Au point mort haut, et 17 *deg.* après cet angle, il est perceptible que la combustion se poursuit par propagation du front de flamme tandis que la quantité de carburant consommée par auto-inflammation reste localisée au niveau de la zone de point chaud et n'évolue quasiment plus. Du fait d'un déclenchement plus tardif que préalablement de la combustion, il n'y a plus d'auto-inflammation des gaz frais en amont du front de flamme lors de sa propagation.

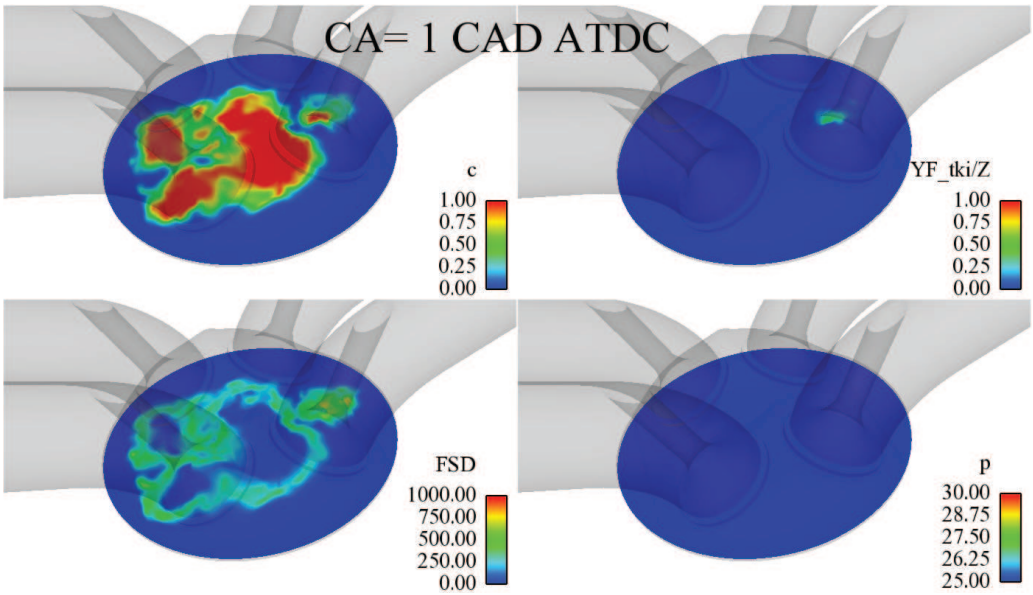


FIG. 7.16 – Angle Vilebrequin = 1 *deg*. AVA = 30 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

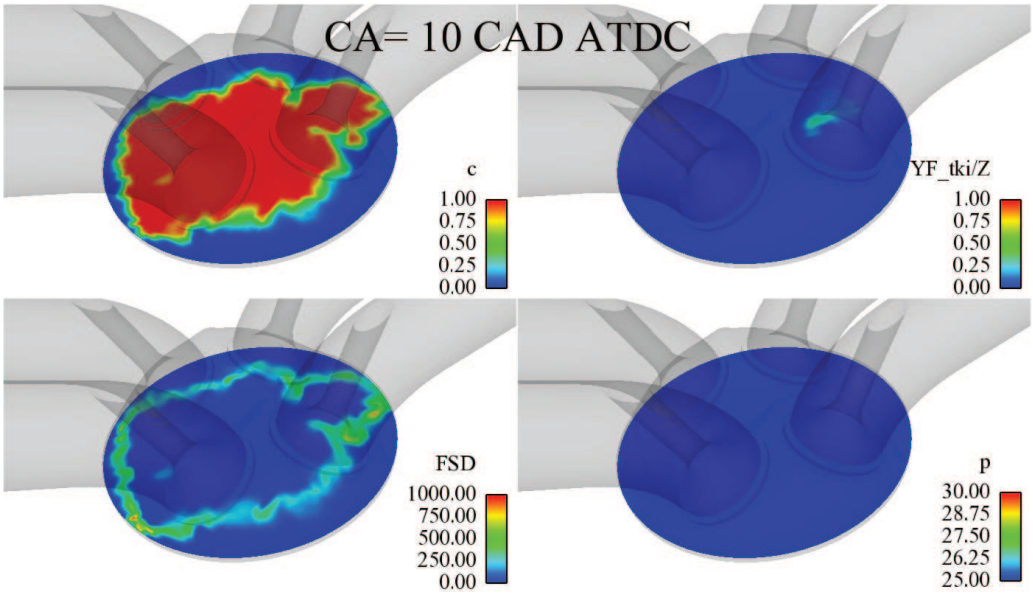


FIG. 7.17 – Angle Vilebrequin = 10 *deg*. AVA = 30 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

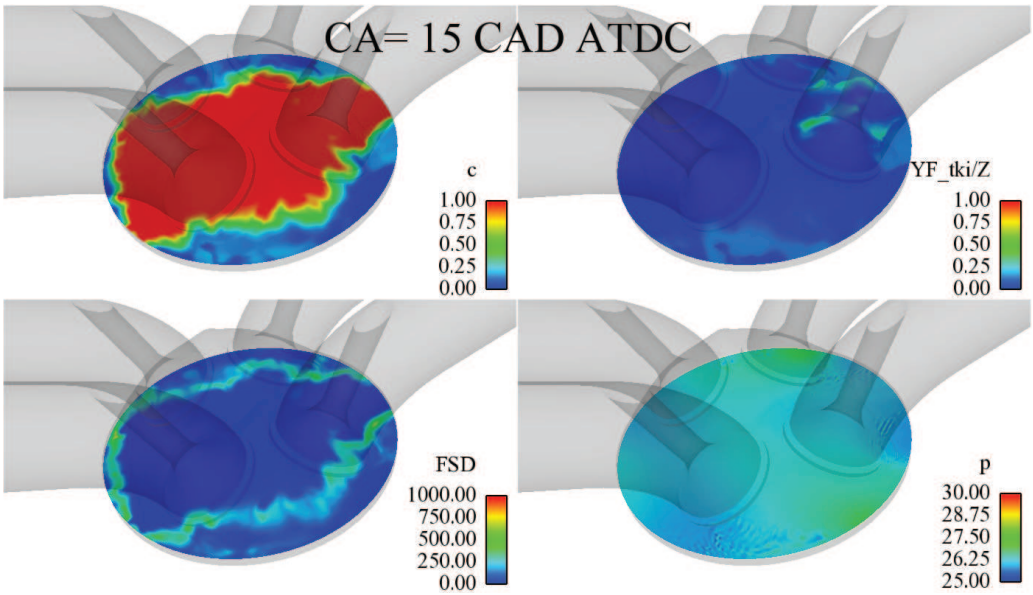


FIG. 7.18 – Angle Vilebrequin = 15 *deg*. AVA = 30 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

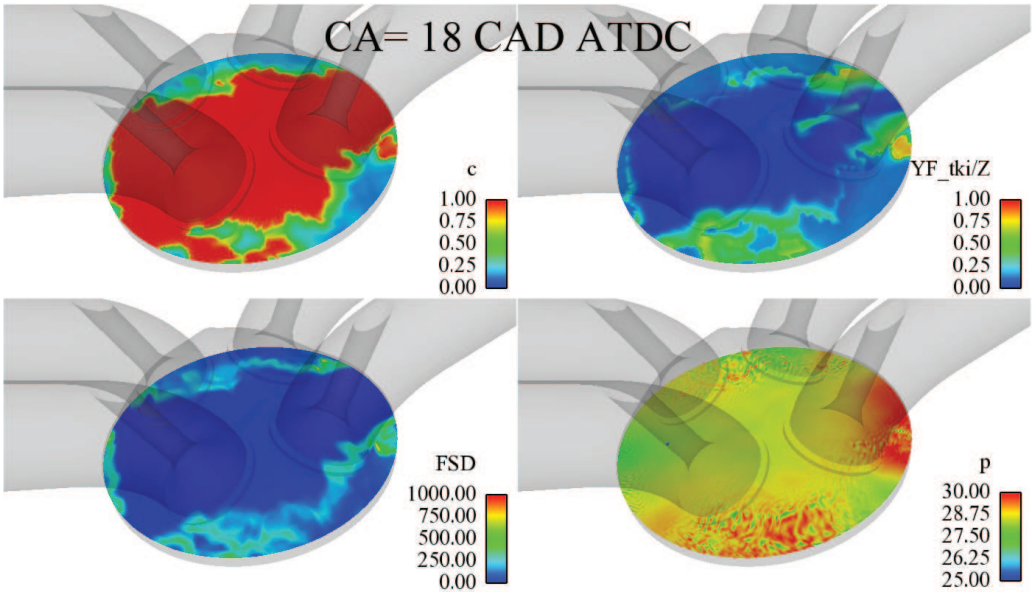


FIG. 7.19 – Angle Vilebrequin = 18 *deg*. AVA = 30 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

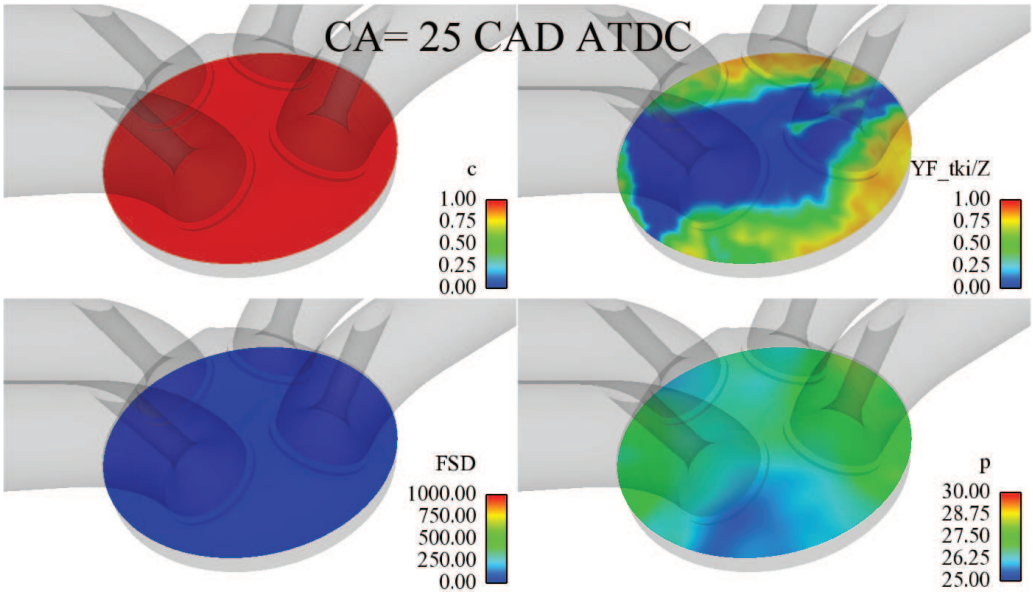


FIG. 7.20 – Angle Vilebrequin = 25 *deg*. AVA = 30 *deg*. Champs de variable d'avancement, carburant consommé par AI normalisé, densité de surface de flamme et pression.

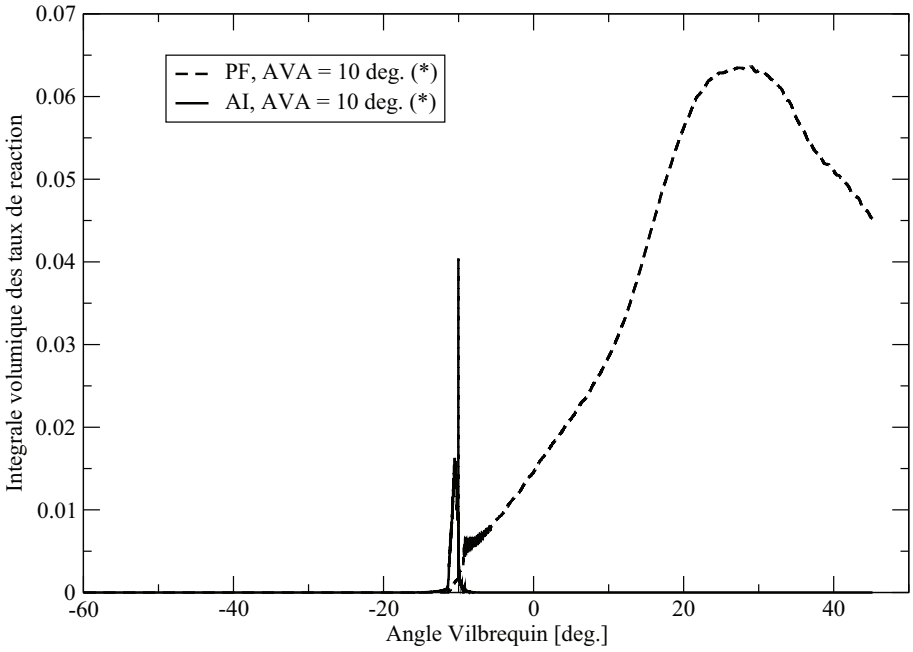


FIG. 7.21 – Evolution temporelle des intégrales volumiques des taux de réaction dédiés à la propagation de flamme et à l'auto-inflammation pour une avance à l'allumage de 10 *deg*. en présence d'un point chaud.

Bien que le carburant considéré ici soit du n-heptane et que le moteur fonctionne à faible charge, il a été possible de reproduire les phénomènes physiques apparaissant lors de l'apparition du pré-allumage. Néanmoins, la brutalité du phénomène n'a pas été reproduite, le pré-allumage n'apparaissant que tardivement et ne conduisant pas à un cliquetis intense. L'utilisation de l'iso-octane et de charges plus importantes permettraient sans doute d'obtenir une meilleure ressemblance qualitative avec une courbe de pression expérimentale.

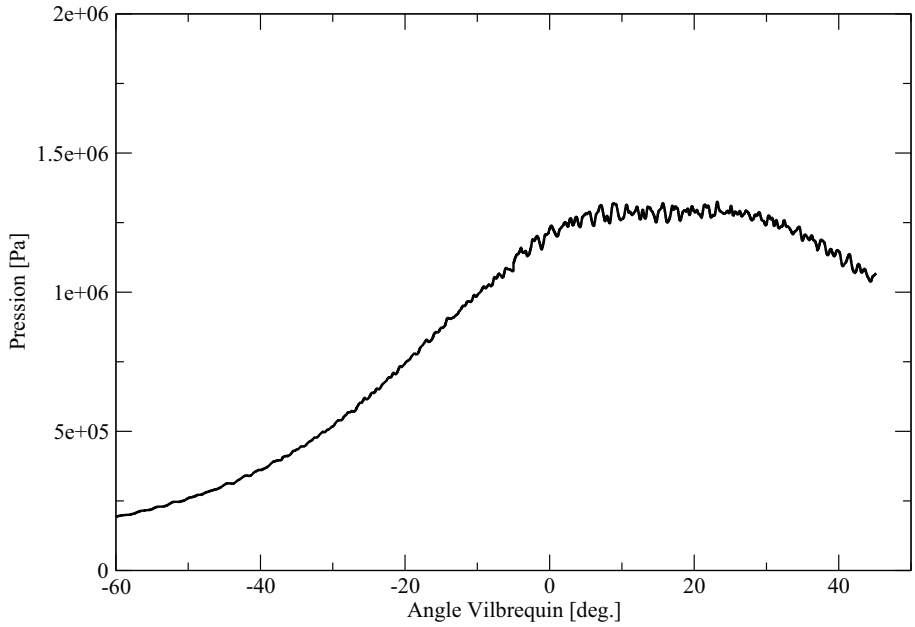
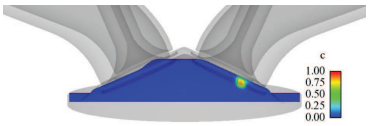
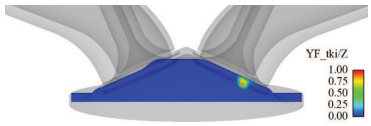


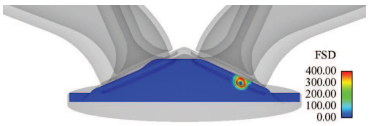
FIG. 7.22 – Evolution de la pression cylindre pour une avance à l'allumage de 10 *deg.* en présence d'un point chaud.



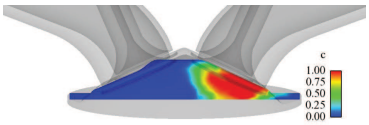
(a) $\tilde{c}$, 11 *deg.* avant point mort haut combustion.



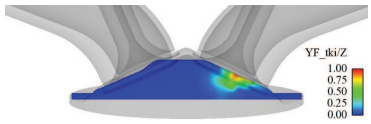
(b) $\widetilde{Y_F^{AI}}/\widetilde{Z}$, 11 *deg.* avant point mort haut combustion.



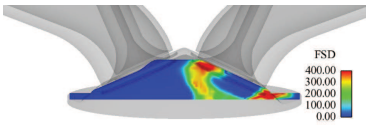
(c) Densité de surface de flamme, 11 *deg.* avant point mort haut combustion.



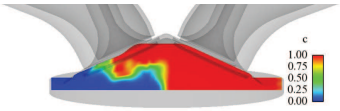
(d) $\tilde{c}$, point mort haut combustion.



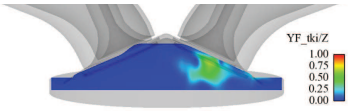
(e) $\widetilde{Y_F^{AI}}/\widetilde{Z}$, point mort haut combustion.



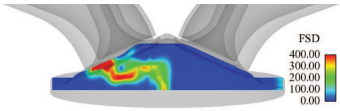
(f) Densité de surface de flamme, point mort haut combustion.



(g) $\tilde{c}$, 17 *deg.* après point mort haut combustion.



(h) $\widetilde{Y_F^{AI}}/\widetilde{Z}$, 17 *deg.* après point mort haut combustion.



(i) Densité de surface de flamme, 17 *deg.* après point mort haut combustion.

FIG. 7.23 – Evolutions instationnaires des champs de variables d'avancement et de densité de surface de flamme dans le plan y=0.

7.3 Conclusion

Dans ce chapitre, le modèle I a été appliqué à des simulations de divers points de fonctionnement d'un moteur monocylindre IFP à 4 soupapes afin de vérifier son potentiel de prédiction de combustions anormales comme le cliquetis et le pré-allumage. Des limitations intrinsèques aux modélisations sont cependant à souligner : les faibles charges utilisées lors des simulations et le choix du n-heptane pour modéliser le comportement du carburant essence notamment.
Des résultats intéressants ont été obtenus puisque les courbes de pression cylindre associées à l'apparition du cliquetis présentaient une allure proche de signaux expérimentaux avec des oscillations de pression de fortes amplitudes. De plus, l'effet de contrôle du cliquetis par le choix de l'avance à l'allumage a été retrouvé.
Pour le cas du pré-allumage, la présence d'un point chaud a permis de promouvoir une auto-inflammation locale qui a été suivie d'une propagation de flamme. Cette flamme et celle générée par l'étincelle ont simultanément provoqué la compression et l'auto-inflammation des gaz frais restants dans la chambre.
Un autre cas a été réalisé pour lequel une auto-inflammation se produit avant l'allumage et initie une flamme de prémélange.
Des perspectives intéressantes s'offrent donc pour l'étude du pré-allumage en étudiant cette fois un point de fonctionnement à forte charge et en tabulant l'iso-octane dont la chimie est beaucoup plus proche de l'essence.
Finalement le travail de ce chapitre démontre le potentiel du couple LES / modèle I pour l'investigation des combustions anormales en moteur à allumage commandé.

Conclusions et perspectives

Conclusions

Des normes anti-pollution de plus en plus restrictives aiguillent les constructeurs automobiles vers la proposition de motorisations de plus en plus sophistiquées. L'optimisation des combustions se déroulant dans ces moteurs nécessite des moyens d'investigation fins au travers des diagnostics optiques et de la simulation numérique tridimensionnelle des écoulements. La présente thèse s'est posée comme une contribution à l'élaboration d'un modèle générique permettant d'investiguer les modes de combustion complexes. Le contexte de la LES a été choisi pour la réalisation des développements, ce type d'approche tenant compte des variabilités cycliques de la combustion au contraire des modélisations RANS usuellement exploitées.

Un premier chapitre a permis la présentation de quelques notions liées à la combustion en régime laminaire pour introduire les équations filtrées de la LES et les termes à fermer. Les modèles de combustion de la littérature permettant de fermer les taux de réaction filtrés ont été détaillés tout en mettant en avant les avantages et inconvénients de chacun. Le meilleur candidat pour une modélisation générique de la combustion s'est avéré être PCM-FPI, de par son formalisme modulaire et les nombreux modes de combustion traités lors de précédents travaux. Néanmoins quelques inconvénients liés à son emploi ont été rappelés.
Les modèles spécifiques à des applications moteur ont également été étudiés. Ceux-ci présentaient globalement une robustesse d'emploi mais aussi des simplifications en termes de modélisation de la chimie et de représentation de la flamme de diffusion. Le modèle ECFM-3Z s'est distingué parmi l'existant puisqu'il rendait compte de toutes les combustions en dépit des inconvénients mentionnés précédemment.
A partir de ces deux séries de revue, deux stratégies sont ressorties. En effet, il semblait d'abord possible de s'inspirer de PCM-FPI pour la proposition d'un modèle générique en recherchant à trouver des solutions à ses inconvénients. Par ailleurs, une modélisation adaptée au moteur comme ECFM-3Z pouvait être étendue à la LES tout en s'efforçant de réduire ses limitations.

Lors du filtrage des équations de transport de l'aérothermochimie était apparu un terme rendant compte du transport turbulent. Plusieurs fermetures proposées dans la littérature ont été confrontées à des résultats de DNS, puis ont été testées lors de simulations de type LES d'un brûleur prémélangé de laboratoire au chapitre 2. La formulation proposée par Richard [133] s'est avérée la plus pertinente et a été retenue pour la suite.

Le cas particulier de la flamme de prémélange a été abordé au chapitre 3. Le manque de contrôle de la vitesse de flamme turbulente *a priori* pour le modèle PCM-FPI, lié à l'utilisation de β-pdf pour la fermeture des taux de réaction filtrés et au choix de fermeture de la dissipation scalaire de sous-maille, a tout d'abord été mis en avant. Les résultats de travaux récents associés à l'emploi d'une pdf bimodale ont été rappelés et ont servi de base pour la proposition de deux modèles pour le prémélange associant l'équation de transport de la densité de surface de flamme de ECFM-LES et la tabulation de la chimie. Les modèles proposés ont été testés au travers de simulations LES de la même flamme de laboratoire que précédemment et comparés au modèle PCM-FPI. En plus d'une prédiction des espèces chimiques comparable à ce modèle, la formulation des modèles PCM-CFM I et II a permis le contrôle de la vitesse de propagation du front de flamme.

Afin de permettre l'utilisation des modèles PCM-CFM I et II lors de calculs moteur à allumage commandé, une modélisation propre à l'allumage par bougie a été proposée pour chaque modèle au chapitre 4, en se basant sur le modèle AKTIM-Euler. La modélisation par PCM-CFM I et II de la croissance du noyau de flamme aux instants suivant l'allumage par bougie a été validée à partir d'une expérience de laboratoire. D'autre part, d'autres cas d'allumage représentatifs des conditions rencontrées en moteur ont été réalisés afin de comparer les comportements des modèles PCM-CFM I et II couplés à AKTIM-Euler à celui de PCM-FPI couplé au même modèle. Il s'est avéré qu'un niveau d'énergie minimal en sous-maille était requis par PCM-FPI pour permettre le développement du noyau de flamme initial. La dépendance au choix de la fermeture de la dissipation scalaire de sous-maille a également été montrée.

Le chapitre 5 a abordé la modélisation de l'auto-inflammation en milieu homogène couplée aux modèles PCM-CFM I et II. Le modèle I a ainsi été obtenu en intégrant le modèle TKI, utilisé par ECFM-3Z, au modèle PCM-CFM I. Le modèle II provient de l'ajout de la modélisation proposée par J. Galpin pour l'auto-inflammation au modèle PCM-CFM II au travers d'une fonction comparant la cinétique de l'auto-inflammation et de la flamme de prémélange.
Deux cas tests simplifiés représentatifs des phénomènes rencontrés lors du cliquetis et du pré-allumage ont été simulés par les deux modèles. Les modèles I et II ont démontré leur fonctionnalité et la prédiction qualitative des mêmes phénomènes. En revanche les cinétiques caractéristiques ont été différentes, principalement du fait de la fonction introduite au modèle II et de la fermeture du taux de réaction filtré pour l'auto-inflammation par une β-pdf. Le modèle I, de par sa simplicité semble le plus naturellement exploitable pour des calculs moteur LES.

Une extension théorique du chapitre 5 a été offerte par le chapitre 6. Le but était alors d'étendre les modèles I et II aux cas de combustions en milieux stratifiés en richesse, comme cela est le cas dans les moteurs à injection directe. Pour le modèle I, le principe a tout d'abord consisté à inclure une pdf en fraction de mélange de sorte à intégrer les effets des stratifications en richesse de sous-maille. Le modèle TKI a ensuite été modifié pour tenir compte de délais d'auto-inflammation caractéristiques d'une équation de flammelette plutôt que de réacteurs homogènes. Enfin, l'indice de flamme a permis d'ajoindre un modèle pour la flamme de diffusion inspiré de ADF-PCM.
Concernant le modèle II, l'extension a consisté à ajoindre une pdf en fraction de mélange.

Rappelons que les modélisations proposées n'ont pas été testées.

Enfin, des applications du modèle I ont été réalisées au chapitre 7 afin de montrer son potentiel pour l'investigation de combustions anormales pouvant être rencontrées dans les moteurs à allumage commandé comme le cliquetis et le pré-allumage. Ces cas étant qualitatifs, le n-heptane, bien que son indice d'octane ne soit pas du tout représentatif de l'essence, a été utilisé comme carburant de sorte à promouvoir l'apparition des auto-inflammations. Des signaux de pression proches de tendances expérimentales ont été reproduits ainsi que l'effet du retard à l'allumage sur l'apparition du cliquetis. D'autre part, quelques cas ont permis de montrer qu'il était possible de retrouver dans des cas de calculs réalistes les phénomènes associés au pré-allumage à savoir une auto-inflammation locale suivie par la propagation d'une flamme et la combustion en masse du mélange de gaz frais restant dans la chambre.

Perspectives

Des perspectives existent pour le travail qui a été réalisé dans cette thèse :

- tout d'abord le modèle I qui a été proposé peut déjà être exploité pour la réalisation d'études par la LES de combustions anormales dans un moteur à allumage commandé, en utilisant un carburant réaliste et en se basant sur des points de fonctionnement expérimentaux ;

- le modèle II intègre une technique de tabulation FPI pour la chimie. Or des problèmes ont été mis en avant par d'autres travaux pour cette modélisation lors de la phase de détente et des développements sont actuellement en cours pour palier ces inconvénients [74, 102]. Il faudra donc intégrer ces travaux, lorsque ceux-ci seront achevés, au modèle proposé dans la thèse de sorte à ce que celui-ci soit utilisable pour des calculs moteur ;

- afin d'améliorer la prédiction des espèces chimiques dans le cas de calculs moteur avec le modèle I, il serait pertinent d'ajoindre un modèle de post-oxydation c'est-à-dire représentatif de la chimie se déroulant en aval du front de flamme. Une solution simple à court terme pourrait consister à reprendre ce qui est utilisé dans le modèle ECFM-3Z [7, 34] ;

- afin de donner un caractère plus générique aux modèles, il faut également modéliser la possible extinction de la flamme de prémélange, lorsque par exemple celle-ci se propage dans un milieu stratifié et parvient dans une zone trop pauvre pour que sa propagation se poursuive. Dans ce cas, le front de flamme doit disparaître, ce qui se traduit au niveau de la modélisation par une destruction de la densité de surface de flamme. Celle-ci pourrait par exemple être pilotée par un terme source fonction du nombre de Karlovitz, comme cela a été proposé dans un travail récent [118] ;

- afin d'utiliser les modèles proposés pour la réalisation de calculs LES de moteurs à injection directe, il reste à coupler à ceux-ci un modèle d'injection, comme celui de Martinez *et al.* [95] et à valider l'ensemble.

Bibliographie

[1] R.G. Abdel-Gayed, D. Bradley, M.N. Hamid, and M. Lawes. Lewis number effects on turbulent burning velocity. *Proc. of the Combustion Institute*, 20 :505–512, 1984.

[2] P. Adomeit, S. Pischinger, R. Aymanns, M. Graf, G. Stapf, and O. Lang. Analysis of cycling fluctuations of charge motion and mixture formation in a DISI engine in stratified operation. *SAE*, 2007-01-1412, 2007.

[3] S.F. Ahmed, R. Balachandran, T. Marchione, and E. Mastorakos. Spark ignition of turbulent nonpremixed bluff-body flames. *Combust. Flame*, 151 :366–385, 2007.

[4] G. Albouze, T. Poinsot, and L. Gicquel. Chemical kinetics modeling and les combustion model effects on a perfectly premixed burner. *C. R. Mecanique*, 337(6-7) :318–328, 2009.

[5] N.W.H. Armstrong and K.N.C. Bray. Premixed turbulent combustion flowfield measurements using PIV and LST and their application to flamelet modelling of engine combustion. In SAE Paper 922322, editor, *SAE Meeting*, 1992.

[6] T.A. Baritaud. High speed schlieren visualization of flame initiation in a lean operating S.I. engine. *SAE*, 872152, 1987.

[7] T.A. Baritaud, J.-M. Duclos, and A. Fusco. Modeling turbulent combustion and pollutant formation in stratified charge SI engines. *Proc. Combust. Inst.*, 26 :2627–2635, 1996.

[8] N. Bharadwaj, C.J. Rutland, and S. Chang. Large eddy simulation modelling of spray-induced turbulence effects. *Int. J. Engine Res.*, 10(2) :97–119, 2009.

[9] R. W. Bilger. Conditional moment closure for turbulent reacting flow. *Phys. Fluids*, 5(2) :436–444, 1993.

[10] M. Boger. *Modélisation de sous-maille pour la simulation aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée.* PhD thesis, Centrale Paris, 2000.

[11] M. Boger and D. Veynante. Large eddy simulations of a turbulent premixed v-shape flame. In C. Dopazo, editor, *Advances in Turbulence VIII*, pages 449 – 452. CIMNE, Barcelona, Spain, 2000.

[12] M. Boger, D. Veynante, H. Boughanem, and A. Trouvé. Direct numerical simulation analysis of flame surface density concept for large eddy simulation of a turbulent premixed combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 27 :917–925, 1998.

[13] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinsot, and C. Bérat. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame*, 154 :2–22, 2008.

[14] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. *Prog. Energ. Combust. Sci.*, 14 :245., 1988.

[15] G. Boudier, N. Lamarque, G. Staffelbach, L.Y.M. Gicquel, and T. Poinsot. Thermo-acoustic stability of a helicopter gas turbine combustor using large-eddy simulation. *Int. J. Aeroacoustics*, 8(1) :69–94, 2009.

[16] H. Boughanem and A. Trouvé. The domain of influence of flame instabilities in turbulent premixed combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 27 :971–978, 1998.

[17] S. Bougrine, S. Richard, and D. Veynante. Modelling and simulation of the combustion of ethanol blended fuels using a 0D Coherent Flame Model. *SAE technical paper 2009-24-0016*, 2009.

[18] D. Bradley, P.H. Gaskell, and A.K.C. Lau. A mixedness-reactedness flamelet model for turbulent diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.*, 23 :685–692, 1990.

[19] D. Bradley, P.H. Gaskell, and X.G. Xu. The mathematical modeling of liftoff and blowoff of turbulent non-premixed methane jet flames at high strain rates. *Proc. Combust. Inst.*, 27 :1199–1206, 1998.

[20] D. Bradley, L.K. Kwa, A.K.C. Lau, and M. Missaghi. Laminar flamelet modeling of recirculating premixed methane and propane air combustion. *Combust. Flame*, 71 :109–122, 1988.

[21] K.N.C. Bray. The challenge of turbulent combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 26 :1–26, 1996.

[22] K.N.C. Bray, M. Champion, and P.A. Libby. The interaction between turbulence and chemistry in premixed turbulent flames. In *Turbulent Reactive Flows (Lecture Notes in Engineering, vol 40)*, pages 541–563. R. Borghi and S.N. Murphy (Berlin : Springer), 1989.

[23] K.N.C. Bray, M. Champion, P.A. Libby, and N. Swaminathan. Finite rate chemistry and presumed PDF models for premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 146(4) :665–673, 2006.

[24] K.N.C. Bray, P. Domingo, and L. Vervisch. Role of the progress variable in models for partially premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 141(4) :431–437, 2005.

[25] K.N.C. Bray, P.A. Libby, and J.B. Moss. Unified modeling apporoach for premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 61 :87–102, 1985.

[26] K.N.C. Bray and J.B. Moss. A unified statistical model of the premixed turbulent flame. *Acta Astronautica*, 4 :291 – 319, 1977.

[27] T.D. Butler and P.J. O'Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. *Proc. Combust. Inst.*, 16 :1503–1515, 1977.

[28] V. Bykov and U. Maas. The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds. *Combust. Theory Model.*, 11 :839–862, 2007.

[29] R. Cabra, J.Y. Chen, R.W. Dibble, A.N. Karpetis, and R.S. Barlow. Lifted methane-air jet flames in a vitiated coflow. *Combust. Flame*, 143 :491–506, 2005.

[30] I. Celik, I. Yavuz, and A. Smirnov. Large eddy simulations of in-cylinder turbulence for internal combustion engines. *Int. J. Engine Res.*, 2(2) :119–148, 2001.

[31] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante. A power-law wrinkling model for les of premixed turbulent combustion. part I : Non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame*, 131(1-2) :159–180, 2002.

[32] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante. A power-law wrinkling model for les of premixed turbulent combustion. part II : Dynamic formulation. *Combust. Flame*, 131(1-2) :181–197, 2002.

[33] Y.C. Chen and R.W. Bilger. Turbulence and scalar transport in premixed bunsen flames of lean hydrogen/air mixtures. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :521–528, 2000.

[34] O. Colin and A. Benkenida. The 3-Zones Extended Coherent Flame model ECFM-3Z for Computing Premixed /Diffusion Combustion. *Oil Gas Sci. Technol.*, 59 :593–609, 2004.

[35] O. Colin, A. Benkenida, and C. Angelberger. 3D Modeling of mixing, ignition and combustion phenomena in highly stratified gasoline engines. *Oil Gas Sci. Technol.*, 58 :47–62, 2003.

[36] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinsot. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids*, 12(7) :1843–1863, 2000.

[37] O. Colin, A. Pires da Cruz, and S. Jay. Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :2649–2656, 2005.

[38] Equipe de rédaction principale, R.K. Pachauri, and A. Resinger. Bilan 2007 des changements climatiques. Contributions des Groupes de travail I, II et III au quatrième Rapport du groupe d'experts intergouvernemental de l'évolution du climat. Technical report, GIEC, Genève, Suisse, 2007.

[39] J. Dec. Advanced compression-ignition engines - understanding the in-cylinder processes. *Proc. Combust. Inst.*, 32 :2727–2742, 2009.

[40] P. Domingo, L. Vervisch, and K.N.C. Bray. Modeling partially premixed flamelets in large eddy simulation. *Combust. Theory Model.*, 6 :529–551, 2002.

[41] P. Domingo, L. Vervisch, S. Payet, and R. Hauguel. DNS of a turbulent premixed V-flame and LES of a ducted flame using a FSD-PDF subgrid scale closure with FPI-tabulated chemistry. *Combust. Flame*, 143(4) :566–586, 2005.

[42] P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante. Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combust. Flame*, 152(3) :415–432, 2008.

[43] C. Dopazo and E. O'Brien. Functional formulation of nonisothermal turbulent reactive flows. *Phys. Fluids*, 17 :1968–1975, 1974.

[44] M.C. Drake and D. Haworth. Advanced gasoline engine development using optical diagnostic and numerical modeling. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :99–124, 2007.

[45] J.F. Driscoll. Turbulent premixed combustion : Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 34 :91–134, 2008.

[46] J-M. Duclos and O. Colin. Arc and kernel tracking ignition model for 3d spark-ignition engine calculations. *Int. Symp. COMODIA*, pages 343–350, 2001.

[47] J.-M. Duclos, D. Veynante, and T. Poinsot. A comparison of flamelet models for premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 95 :101–117, 1993.

[48] J.-M. Duclos and M. Zolver. 3D modeling of intake injection and combustion in DI-SI engine under homogeneous and stratified operating condition. *COMODIA*, 1998.

[49] V. Dugué, N. Gauchet, and D. Veynante. Applicability of large eddy simulation to the fluid mechanics in a real engine configuration by means of an industrial code. *SAE*, 2006-01-1194, 2006.

[50] C. Duwig, L. Fuchs, P. Griebel, P. Siewert, and E. Boschek. Study of a Confined Turbulent Jet : Influence of Combustion and Pressure. *AIAA J.*, 45(3) :624–661, March 2007.

[51] H. El-Asrag and S. Menon. Large eddy simulation of bluff-body stabilized swirling non-premixed flames. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :1747–1754, 2007.

[52] J. Ewald and N. Peters. On unsteady premixed turbulent burning velocity predictions in internal combustion engines. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :3051–3058, 2007.

[53] F. Fichot, F. Lacas, D. Veynante, and S. Candel. One-dimensional propagation of a premixed turbulent flame with the coherent flame model. *Combust. Sci. Technol.*, 89 :1–26, 1993.

[54] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Approximating the chemical structure of partially premixed and diffusion counterflow flames using FPI flamelet tabulation. *Combust. Flame*, 140 :147–160, 2005.

[55] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Premixed turbulent combustion modeling using tabulated chemistry and pdf. *Proc. Combust. Inst.*, 30 :867–874, 2005.

[56] M. Frenklach, T. Bowman, G. Smith, and B. Gardiner. *http ://www.me.berkeley.edu/gri-mech/.*

[57] J. Galpin. *Modélisation LES de la combustion avec une prise en compte des effets de cinétique détailée et en perspective d'application moteur.* PhD thesis, INSA Rouen, 2007.

[58] J. Galpin, C. Angelberger, A. Naudin, and L. Vervisch. Large-eddy simulation of H-2-air auto-ignition using tabulated detailed chemistry. *J. Turbulence*, 9(13) :1–21, 2008.

[59] J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, and P. Domingo. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combust. Flame*, 155(1-2) :247–266, 2008.

[60] W. Ghedhaifi. *Modélisation de la combustion turbulente par le modèle de Flamme Cohérente couplé à une méthode de réduction de cinétique chimique en vu de la prédiction de l'emission des polluants.* PhD thesis, Centrale Paris, 2006.

[61] O. Gicquel. *Développement d'une nouvelle méthode de réduction de schémas cinétiques : Application au méthane.* PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 1999.

[62] O. Gicquel, N. Darabiha, and D. Thévenin. Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :1901–1908, 2000.

[63] D. Goryntsev, A. Sadiki, M. Klein, and J. Janicka. Large eddy simulation based analysis of the effects of cycle-to-cyle variations on air-fuel anlysis mixing in realistic DISI IC-engines. *Proc. Combust. Inst.*, 32 :2759–2766, 2009.

[64] B. Hakberg and A.D. Gosman. Analytical determination of turbulent flame speed from combustion models. *Proc. Combust. Inst.*, 20 :225–232, 1984.

[65] E.R. Hawkes and R.S. Cant. A flame surface density to large eddy simulation of premixed combustion. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :51–58, 2000.

[66] E.R. Hawkes and R.S. Cant. Implications of a flame surface density approach to large eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 126(3) :1617–1629, 2001.

[67] D.C. Haworth. A probability density function / flamelet method for partially premixed turbulent combustion. *Center for Turbulence Research, Proceedings of the Summer Program*, pages 145–156, 2000.

[68] R. Herweg and G.F.W. Ziegler. Flame kernel formaation in a spark-ignition engine. *Int. Symp. COMODIA*, pages 173–178, 1990.

[69] J.B. Heywood. *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw and Hill Series in Mechanical Engineering. McGraw-Hill, New-York, 1988.

[70] J.O. Hirschfelder, C.F. Curtiss, and R.B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley and Sons, New York, 1969.

[71] C. Hirt, A. Amsden, and J. Cook. An arbitrary lagrangian-eulerian computing method for all flow speeds. *J. Comp. Phys.*, 14 :227–253, 1974.

[72] B. Hu, C.J. Rutland, and T.A. Shethaji. Combustion modeling of conventional Diesel-type and HCCI-type Diesel combustion with large eddy simulations. *SAE 2008-01-0958*, 2008.

[73] S. Jay, P. Béard, and A. Pires da Cruz. Modeling coupled processes of CO and soot formation and oxidation for conventional and HCCI Diesel combustion. *SAE*, 2007-01-0162, 2007.

[74] S. Jay, O. Colin, C. Pera, and P. Béard. Couplage FPI/polluants dans ECFM3Z. Prise en compte des effets de détente dans FPI. Optimisation de du modèle de post-oxydation CORK. Technical report, IFP-GSM, 2008.

[75] S. Jay, C. Pera, and O. Colin. Tabulation de polluants par la méthode FPI et de l'étude GSM DC1 2006 - FPI-moteur. Technical Report 59766, IFP-GSM, 2007.

[76] B. Jin, R. Grout, and W.K. Bushe. Conditional source-term estimation as a method for chemical closure in premixed turbulent reacting flow. *Flow, Turbul. Combust.*, 81(4) :563–582, 2008.

[77] J.C. Keck, J.B. Heywood, and G. Noske. Early flame development and burning rates in spark ignition engines and their cyclic variability. *SAE*, 870164, 1987.

[78] R.J. Kee, J.F. Grcar, M. Smooke, and J.A. Miller. A fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames. Technical Report SAND85-8240, Sandia National Laboratories, 1985.

[79] A.R. Kerstein, W. Ashurst, and F.A. Williams. Field equation for interface propagation in an unsteady homogeneous flow field. *Phys. Rev. A*, 37(7) :2728–2731, 1988.

[80] A.Y. Klimenko. Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow. *Fluid Dynamics*, 25(3) :327 – 334, 1990.

[81] V. Knop and S. Jay. Latest developments in gasoline auto-ignition modelling applied to an optical CAI engine. *Oil Gas Sci. Technol.*, 61 :121–137, 2006.

[82] E. Knudsen and H. Pitsch. A general flamelet transformation useful for distinguishing between premixed and non-premixed modes of combustion. *Combust. Flame*, 156 :678–696, 2009.

[83] H. Kolla, J.W. Rogerson, N. Chakraborty, and N. Swaminathan. Scalar dissipation rate modeling and its validation. *Combust. Sci. Technol.*, 181 :518–535, 2009.

[84] A.N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C.R. Acad. Sci. USSR*, 30 :301, 1941.

[85] A.N. Kolmogorov, I.G. Petrovski, and N.S. Piskunov. A study of the diffusion equation with increase in the amount of substance, and its application to a biological problem. *Bjul Moskosvkovo Gos Univ*, 1(7) :1–72, 1937.

[86] G. Lacaze, B. Cuenot, T. Poinsot, and M. Oschwald. Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration. *Combust. Flame*, 156 :1166–1180, 2009.

[87] F.-A. Lafossas, M. Castagne, J.P. Dumas, and S. Henriot. Development and validation of a knock model in spark ignition engines using a CFD code. *SAE 2002-01-2701*, 2002.

[88] G. Lecocq, S. Richard, O. Colin, and L. Vervisch. An hybrid presumed pdf and flame surface density approach for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion part 1 : Formalism and simulations of a quasi-steady burner. *Combust. Flame, submitted*.

[89] J.-Ph. Légier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame large eddy simulation model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Summer Program 2000*, pages 157–168, Center for Turbulence Research, Stanford, USA, 2000.

[90] Y.H. Li and S.C. Kong. Diesel combustion modelling using LES turbulence model with detailed chemistry. *Combust. Theory Model.*, 12(2) :205–209, 2208.

[91] T.M. Liou, M. Hall, D.A. Santavicca, and F.N. Bracco. Laser doppler velocimetry measurements in valved and ported engines. *SAE Paper*, 840375, 1984.

[92] U. Maas and S.B. Pope. Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low dimensional manifolds. *Proc. Combust. Inst.*, 24 :103–112, 1992.

[93] U. Maas and S.B. Pope. Simplifying chemical kinetics ; intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combust. Flame*, 88 :239–264, 1992.

[94] T. Mantel and R. Borghi. A new model of premixed wrinkled flame propagation based on a scalar dissipation equation. *Combust. Flame*, 96 :443–457, 1994.

[95] L. Martinez, A. Benkenida, and B. Cuenot. A model for the injection boundary conditions in the context of 3D Simulation of Diesel Spray : Methodology and Analysis. *Fuel*, 89(1) :219–228, 2010.

[96] L. Martinez, A. Vie, S. Jay, A. Benkenida, and B. Cuenot. Large Eddy Simulation of fuel sprays using the eulerian mesoscopic approach. Validations in realistic engine conditions. *11th ICLASS, Vail, USA*, 2009.

[97] W. Meier, P. Weigand, X.R. Duan, and R. Giezendanner-Thoben. Detailed characterization of the dynamics of thermoacoustic pulsations in a lean swirl premixed flame. *Combust. Flame*, 150(1-2) :2–26, 2007.

[98] M. Metghalchi and J.C. Keck. Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combust. Flame*, 38 :143–154, 1980.

[99] J.-B. Michel. *Modélisation turbulente de la combustion d'un mélange hétérogène en auto-inflammation en vue de l'application à la simulation des moteurs Diesel*. PhD thesis, Centrale Paris, 2008.

[100] J.-B. Michel, O. Colin, C. Angelberger, and D. Veynante. Using the tabulated diffusion flamelet model ADF-PCM to simulate a lifted methane-air jet flame. *Combust. Flame*, 156 :1318–1331, 2009.

[101] J.-B. Michel, O. Colin, and D. Veynante. Modeling ignition and chemical structure of partially premixed turbulent flames using tabulated chemistry. *Combust. Flame*, 152 :80–99, 2008.

[102] J.-B. Michel, S. Richard, and O. Colin. Différenciation des avancements AI/PF. Technical Report E2.3, GSM-IFP, 2009.

[103] P. Moin. Advances in large eddy simulation methodology for complex flows. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 23(6) :710–720, 2002.

[104] P. Moin and S.V. Apte. Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors. *AIAA J.*, 44(4) :698–708, 2006.

[105] J. B. Moss. Simultaneous measurements of concentration and velocity in an open premixed turbulent flame. *Combust. Sci. Technol.*, 22 :119–129, 1980.

[106] V. Moureau, P. Domingo, and L. Vervisch. MSC-DNS : a multi-scale convergence methodology for direct numerical simulation of turbulent reacting flows. application in an industrial premixed burner. *Proc. Combust. Inst., Submitted*.

[107] V. Moureau, B. Fiorina, and H. Pitsch. A level set formulation for premixed combustion les considering the turbulent flame structure. *Combust. Flame*, 156 :801–812, 2009.

[108] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinsot. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reactive flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.*, 202(2) :710–736, 2005.

[109] A. Mura, V. Robin, and M. Champion. Modeling of scalar dissipation in partially premixed turbulent flames. *Combust. Flame*, 149(1-2) :217–224, 2007.

[110] K. Naitoh, T. Itoh, and Y. Takagi. Large eddy simulation of premixed-flame in engine based on the mutli-scale formulation and renormalization group theory. *SAE Technical Paper 920590*, 1992.

[111] S. Navarro-Martinez and A. Kronenburg. LES-CMC of a lifted methane flame. *Proc. Combust. Inst.*, 32 :1509–1516, 2009.

[112] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow, Turbul. Combust.*, 62(3) :183–200, 1999.

[113] K.-J. Nogenmyr, P. Petersson, X.S. Bai, A. Nauert, J. Olofsson, C. Brackman, H. seyfried, J. Zetterberg, Z.S. Li, M. Richter, A. Dreizler, M. Linne, and M. Aldèn. Large eddy simulation and experiments of stratified lean premixed methane/air turbulent flames. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :1467–1475, 2007.

[114] I.K. Nwagwe, H.G. Weller, G. Tabor, A.D. Gosman, M. Lawes, C.G.W. Sheppard, and R. Wooley. Measurements and large eddy simulations of turbulent premixed flame kernel growth. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :59–66, 2000.

[115] P.J. O'Rourke and F.V. Bracco. Two scaling transformations for the numerical computation of multidimensional unsteady laminar flames. *J. Comput. Phys.*, 33 :185–203, 1979.

[116] T. Passot and A. Pouquet. Numerical simulation of homogeneous flows in the turbulent regime. *J. Fluid Mech.*, 181 :441, 1987.

[117] A. Patel, S.-C. Kong, and R.D. Reitz. Development and validation of a reduced reaction mechanism for HCCI engine simulations. *SAE 2004-01-558*, 2004.

[118] C. Pera and P. Béard. Modélisation essence, phase 2 : extinction de flammes de prémélange avec ECFM. Technical Report E2.3,60393, IFP-GSM, 2008.

[119] C. Pera, O. Colin, and S. Jay. Development of a FPI detailed chemistry tabulation methodology for internal combustion engines. *Oil Gas Sci. Technol.*, 64 :243–258, 2009.

[120] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10 :319–339, 1984.

[121] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *J. Fluid Mech.*, 384 :107 – 132, 1999.

[122] N. Peters. *Turbulent combustion.* Cambridge University Press, 2000.

[123] S. Pfadler, A. Leipertz, and F. Dinkelacker. Systematic experiments on turbulent premixed bunsen flames including turbulent flux measurements. *Combust. Flame*, 152 :616–631, 2008.

[124] S. Pfadler, A. Leipertz, F. Dinkelacker, J. Wäsle, A. Winkler, and T. Sattelmayer. Two-dimensional direct measurement of the turbulent flux in turbulent premixed swirl flames. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :1337–1344, 2007.

[125] A. Pires da Cruz, A.M. Dean, and J.M. Grenda. A numerical study of the laminar flame speed of stratified methane/air flames. *Proc. Combust. Inst.*, 28 :1925–1932, 2000.

[126] H. Pitsch. A consistent level set formulation for large-eddy simulation of premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 143 :587–598, 2005.

[127] H. Pitsch. Large eddy simulation of turbulent combustion. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 38 :453–482, 2006.

[128] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical And Numerical Combustion.* R.T. Edwards, Inc, 2005.

[129] S.B. Pope. Transport equation for the joint probability density function of velocity and scalar in turbulent flow. *Phys. Fluids*, 4 :588–895, 1981.

[130] S.B. Pope. The evolution of surfaces in turbulence. *Int. J. Eng. Sci.*, 26(5) :445–469, 1988.

[131] B. Renou, A. Boukhalfa, D. Puechberty, and M. Trinité. Local scalar flame properties of freely propagating premixed turbulent flames at various lewis numbers. *Combust. Flame*, 123 :507–521, 2000.

[132] B. Réveillé and A. Duparchy. 3D CFD analysis of an abnormally rapid combustion phenomenon in downsized gasoline engines. *Oil Gas Sci. Technol.*, 64 :431–444, 2009.

[133] S. Richard. *Simulation aux grandes échelles de la combustion dans les moteurs à allumage commandé.* PhD thesis, Ecole Centrale Paris, 2005.

[134] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. Combust. Inst.*, 31 :3059–3066, 2007.

[135] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, and 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.

[136] S. Roux, G. Lartigue, T. Poinsot, U. Meier, and C. Bérat. Studies of mean and unsteady flow in a swirled combustor using experiment, acoustic analysis, and large eddy simulations. *Combust. Flame*, 141(1-2) :40–54, 2005.

[137] C.J. Rutland and S. Cant. Turbulent transport in premixed flames. In *Proc. of the Summer Program*, pages 75–94. Center for Turbulence Research, Stanford Univ./NASA-Ames, 1994.

[138] G. Rymer. *Analyse et modélisation du taux de réaction moyen et des mécanismes de transport en combustion turbulente prémélangée.* PhD thesis, Centrale Paris, 2001.

[139] P. Sagaut. *Large eddy simulation for incompressible flows.* Springer, 2005, 3rd edition.

[140] L. Selle, G. Lartigue, T. Poinsot, R. Koch, K.-U. Schildmacher, W. Krebs, B. Prade, P. Kaufmann, and D. Veynante. Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame*, 137(4) :489–505, 2004.

[141] S.S. Shy, W.J. Lin, and J.C. Wei. An experimental correlation of turbulent burning velocities for premixed turbulent methane-air combustion. *Proc. R. Soc. Lond.*, 456 :1997–2019, 2000.

[142] R. Steiner, C. Bauer, C. Krüger, F. Otto, and U. Maas. 3D-simulation of DI-diesel combustion applying a progress variable approach accounting for complex chemistry. *SAE 2004-01-0106*, 2004.

[143] G. Subramanian. *Modélisation de l'auto-inflammation : analyse des effets de la dilution par les gaz brûlés et des intéractions avec la turbulence dédiée aux moteurs Diesel à charge homogène.* PhD thesis, INSA Rouen, 2005.

[144] V. Subramanian, P. Domingo, and L. Vervisch. Large-eddy simulation of forced ignition of an annular bluff-body burner. *Combust. Flame*, 157(3) :579–601, 2010.

[145] N. Swaminathan and K.N.C. Bray. Effect of dilation on scalar dissipation in turbulent premixed flames. *Combust. Flame*, 143(4) :549–565, 2005.

[146] Z. Tan and R.D. Reitz. Development of a universal turbulent combustion model for premixed and direct injection spark/compression ignition engines. *SAE 2004-01-0102*, 2004.

[147] Z. Tan and R.D. Reitz. An ignition and combustion model based on the level-set method for spark ignition engine multidimensional modeling. *Combust. Flame*, 145 :1–15, 2006.

[148] L. Thobois, R. Lauvergne, and T. Poinsot. Using LES to investigate reacting flow physics in engine design process. *SAE*, 2007-01-0166, 2007.

[149] L. Thobois, G. Rymer, T. Souleres, T. Poinsot, and B. Van den Heuvel. Large-eddy simulation for the prediction of aerodynamics in IC engines. *International Journal of Vehicle Design*, 39 :368–382, 2005.

[150] A. Trouvé and T. Poinsot. The evolution equation for the flame surface density. *J. Fluid Mech.*, 278 :1–31, 1994.

[151] A. Trouvé, D. Veynante, K.N.C. Bray, and T. Mantel. The coupling between flame surface dynamics and species mass conservation in premixed turbulent combustion. In *Proc of the Summer Program*, pages 95–124. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., Stanford, 1994.

[152] J.A. van Oijen, F.A. Lammers, and L.P.H. de Goey. Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds. *Combust. Flame*, 127 :2124–2134, 2001.

[153] O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, A. Benkenida, and D. Veynante. Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES. *Combust. Flame*, 156(8) :1525–1541, 2009.

[154] L. Vervisch, E. Bidaux, K.N.C. Bray, and W. Kollmann. Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches. *Phys. Fluids A*, 7(10) :2496–2503, 1995.

[155] L. Vervisch, P. Domingo, G. Lodato, and D. Veynante. Scalar energy fluctuations in large-eddy simulation of turbulent flames : Statistical budgets and mesh quality criterion. *Combust. Flame*, 157(4) :778–789, 2010.

[156] L. Vervisch, R. Hauguel, P. Domingo, and M. Rullaud. Three facets of turbulent combustion modelling : DNS of premixed V-flame, LES of lifted nonpremixed flame and RANS of jet-flame. *J. Turbulence*, 5(4) :1–36, 2004.

[157] D. Veynante and T. Poinsot. Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion. In O. Metais and J. Ferziger, editors, *New tools in turbulence modelling*, pages 105–135. Les Editions de Physique, Springer Verlag, 1997.

[158] D. Veynante, A. Trouvé, K.N.C. Bray, and T. Mantel. Gradient and counter-gradient scalar transport in turbulent premixed flames. *J. Fluid. Mech.*, 332 :263–293, 1997.

[159] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 28 :193–266, 2002.

[160] R. Vicquelin, B. Fiorina, N. Darabiha, O. Gicquel, and D. Veynante. Coupling tabulated chemistry with Large Eddy Simulation of turbulent reactive flows. *C. R. Mecanique*, 337(6-7) :329–339, 2009.

[161] A.W. Vreman, B.A. Albrecht, J.A. van Oijen, and R.J.M. Bastiaans. Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of Sandia flame D and F. *Combust. Flame*, 153(3) :394–416, 2008.

[162] S.M. Walton, X. He, B.T. Ziegler, M.S. Wooldridge, and A. Atreya. An experimental investigation of iso-octane ignition phenomena. *Combust. Flame*, 150 :246–262, 2007.

[163] H.G. Weller, G. Tabor, A.D. Gosman, and C. Fureby. Application of a flame-wrinkling LES combustion model to a turbulent mixing layer. *Proc. Combust. Inst.*, 27 :899–907, 1998.

[164] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno. A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flame. *Proc. Combust. Inst.*, 26 :27–34, 1996.

[165] J.-M. Zaccardi, L. Duval, and A. Pagot. Development of specific tools for analysis and quantification of pre-ignition in a boosted SI engine. *SAE 2009-01-1795*, 2009.

[166] V.L. Zimont. Gas premixed combustion at high turbulence. Turbulent flame closure combustion model. *Exp. Thermal and Fluid Sci.*, 21 :179–186, 2000.

[167] V.L. Zimont. Gradient, counter-gradient transport and their transition in turbulent premixed flames. *Combust. Theory Model.*, 6 :79–101, 2002.