



HAL
open science

Modélisation de la combustion dans des configurations Dual-Fuel

Maxime Tarot

► **To cite this version:**

Maxime Tarot. Modélisation de la combustion dans des configurations Dual-Fuel. Génie des procédés. Université Paris-Saclay, 2021. Français. NNT : 2021UPAST111 . tel-03592541

HAL Id: tel-03592541

<https://theses.hal.science/tel-03592541>

Submitted on 1 Mar 2022

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.

Modélisation de la combustion dans des configurations *Dual-Fuel*

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay

École doctorale n° 579, Sciences Mécaniques et Energétiques, Matériaux et
Géosciences (SMEMaG)
Spécialité de doctorat : Énergétique
Unité de recherche : IFP Energies Nouvelles, 92852 Rueil-Malmaison, France
Réfèrent : CentraleSupélec

Thèse présentée à Rueil-Malmaison, le 16 décembre 2021, par

Maxime TAROT

Composition du jury :

Pascale DOMINGO

Directrice de recherche CNRS, CORIA

Présidente du jury

Andreas KEMPF

Professeur, Université de Duisburg-Essen

Rapporteur & Examineur

Arnaud MURA

Directeur de recherche CNRS, Institut PPRIME

Rapporteur & Examineur

Fabien LACROIX

Ingénieur, Volvo Group Trucks Technology

Examineur

Stéphane JAY

Docteur, HDR, IFPEN

Directeur de thèse

Jean-Baptiste MICHEL

Docteur, IFPEN

Encadrant de thèse

Titre : Modélisation de la combustion dans des configurations Dual-Fuel.

Mots clés : Modélisation numérique, Combustion, Dual-Fuel, Auto-inflammation, Déflagration

Résumé : Le durcissement des restrictions en termes d'émissions polluantes et de gaz à effet de serre impose depuis peu le développement de technologies alternatives aux traditionnels moteurs Diesel, et à allumage commandé. En effet, l'optimisation des technologies existantes (Diesel/allumage commandé) ne suffit plus à répondre aux normes toujours plus sévères. Des technologies comme l'allumage par pré-chambre, SACI/SCCI (Spark Assisted/Controlled Compression Ignition), ou encore RCCI (Reactivity Controlled Compression Ignition) également nommé Dual-Fuel, font partie des axes de développements actuels.

Cette thèse se concentre sur la technologie Dual-Fuel, et vise à proposer une modélisation des phénomènes rencontrés dans ce type de moteur. Le moteur Dual-Fuel repose sur l'allumage d'une charge pré-mélangée pauvre à fort indice d'octane (généralement un mélange air/méthane), par l'injection d'un spray pilote à fort indice de cétane (généralement un carburant Diesel). Ce dispositif permet d'atteindre des rendements comparables au moteur Diesel, tout en diminuant fortement les émissions polluantes de suies, d'oxydes d'azote (NOx). Toutefois, la combustion Dual-Fuel implique une interaction complexe entre des régimes d'auto-inflammation (AI) et de propagation de flamme pré-mélangée, en pratique difficiles à identifier bien que répondant à des mécanismes physiques très différents. La modélisation de ces interactions, et notamment la transition AI→déflagration réclame donc une compréhension approfondie de ces phénomènes.

Du point de vue de la recherche, la simulation numérique est un outil donnant accès à un grand nombre de données utiles à la compréhension de phénomènes complexes. Du point de vue industriel, la simulation numérique est un outil aujourd'hui largement employé pour la conception d'applications réelles. Dans ce travail, la simulation numérique est utilisée pour l'étude fondamentale de la transition AI→déflagration, en vue de fournir une modélisation LES prédictive et indus-

trialisable de ce phénomène en configuration moteur Dual-Fuel. Ce manuscrit se découpe en quatre axes principaux :

I) Le fonctionnement de la technologie Dual-Fuel, ses avantages, ses inconvénients, les difficultés qu'elle implique sont présentés. S'en suit un état de l'art des outils permettant l'identification des régimes d'AI et de déflagration en conditions expérimentales et numériques, ainsi que des outils de modélisation existants et potentiellement applicables dans le cadre de phénomènes de transition AI→déflagration.

II) Une étude fondamentale de la transition AI→déflagration en configurations simplifiées 1D mono/bi-carburant est réalisée, une méthodologie permettant de déterminer le régime de combustion dominant est proposée, et des critères physiques de transition sont identifiés. La vitesse de déplacement du front de réaction ainsi que son épaisseur apparaissent comme des grandeurs essentielles à l'identification des régimes d'AI et de déflagration.

III) Deux approches de modélisation de la transition AI→déflagration, s'appuyant sur des critères de transition préalablement identifiés dans l'étude fondamentale 1D, sont testées sur des conditions 1D similaires. L'apport d'une modélisation reposant sur une résolution directe de la chimie est notamment démontré dans certaines conditions de mélange stratifié.

IV) La prédictivité des modèles de transition AI→déflagration développés dans ce travail est évaluée sur une configuration LES 3D représentative d'un banc expérimental Dual-Fuel présent à l'ETH Zurich. La modélisation développée est également testée sur un cas moteur fictif Dual-Fuel, et démontre le caractère industrialisable de l'approche. Des résultats offrant des perspectives encourageantes en contexte LES sont mis en évidence, et des améliorations sont proposées.

Title : Modelling of combustion in Dual-Fuel applications

Keywords : Numerical simulation, Combustion, Dual-Fuel, Auto-ignition, Deflagration

Abstract : Increasingly stringent regulations in terms of pollutant emissions and greenhouse effect gases require development of alternatives technologies to conventional Diesel and spark-ignition engines. Indeed, optimisation of current technologies (Diesel/spark-ignition) no longer suffices to satisfy more restrictive regulations. Recently developed technologies such as SACI/SCCI (Spark Assisted/Controlled Compression Ignition), or RCCI (Reactivity Controlled Compression Ignition) also referred as Dual-Fuel are seen as promising.

This PhD thesis is focused on Dual-Fuel technology and aims at modelling specific combustion phenomena encountered in this type of technology. Dual-Fuel engine relies on the ignition of a homogeneous, lean, and highly knock-resistant (usually air/methane) main charge, by injecting a highly reactive pilot spray (usually Diesel fuel). This strategy shows capable to reach high efficiencies comparable with conventional Diesel engines, while strongly mitigating associated pollutant emissions (especially NO_x and soots). However, Dual-Fuel combustion involves both auto-ignition (AI) and premixed flame propagation (deflagration) regimes, which are in practice difficult to identify although driven by very different phenomena. Thus, modelling regimes interactions and more specifically AI → deflagration transition requires a strong understanding of this specific phenomena, but also a regime identification methodology.

From a research standpoint, numerical simulation provides access to a large amount of data allowing the understanding and modelling of complex phenomena. From an industrial standpoint, numerical simulation is widely used to design concrete technologies. In this PhD work, numerical simulation is used for a fundamental study of AI → deflagration

transition, in the objective of providing a predictive and industrially viable modelling of this phenomenon in engine-relevant conditions. This manuscript is divided in four main parts :

I) Working principle of Dual-Fuel technology, advantages, drawbacks, and challenges are presented. Then, a state of the art of existing tools developed for AI and deflagration regime identification in both experimental and numerical context is detailed. Modelling approaches possibly applicable to AI → deflagration transition are also exposed.

II) A fundamental study of AI → deflagration transition in 1D simplified single/dual-fuel configurations is conducted. Combustion regime (AI/deflagration) identification methodology is proposed, and transition criteria are identified. Displacement velocity and thickness of the reaction front appear as key parameters.

III) Two modelling approaches for AI → deflagration transition, based on criteria preliminarily identified in fundamental 1D study, are tested on similar 1D conditions. The advantage of a modelling involving a direct resolution of chemistry is evidenced, specifically in highly stratified conditions.

IV) The predictivity of AI → deflagration modelling developed in this work is evaluated on a 3D LES configuration, representative of an experimental academic test bench, present at ETH Zurich. The developed modelling is also tested on a fictive engine case, and showed industrially viable. Results display encouraging perspectives in engine LES context, and axis of improvement are proposed.

Nomenclature

Acronymes

Description	Symbole	Dimension	Unité
	$aSOI$		
	After Start Of Injection		
	P_{SOI}		
	Pressure at Start Of Injection		
	T_{SOI}		
	Temperature at Start Of Injection		
	AI		
	Auto-Inflammation		
	ARC		
	Analytically Reduced Chemistry		
	DNS		
	Direct Numerical Simulation		
	DV		
	Degré Vilebrequin		
	ECFM		
	Extented Coherent Flamet Model		
	EGR		
	Exhaust Gaz Recirculation		
	GB		
	Gaz Brûlés		
	GDI		
	Gasoline Direct Injection		
	GF		
	Gaz Frais		
	HCCI		
	Homogeneous Charge Compression Ignition		
	HRR		
	Heat Release Rate		
	HTC		
	High Temperature Chemistry		
	LES		
	Large Eddy Simulation		
	LTC		
	Low Temperature Chemistry		
	NTC		
	Negative Temperature Coefficient		
	PCCI		
	Premixed Charge Compression Ignition		
	PMH/B		
	Point Mort Haut/Bas		
	QSS		
	Quasi-Steady State		
	RANS		
	Reynolds Averaged Navier-Stokes		
	RCCI		
	Reactivity Controlled Compression Ignition		
	SACI		
	Spark Assisted Compression Ignition		
	SCCI		
	Spark Controlled Compression Ignition		
	TFM		
	Thickened Flame Model		
	TKI		
	Tabulated Kinetics of Ignition		

Lettres Grecques

Description	Symbole	Dimension	Unité
-------------	---------	-----------	-------

χ	Taux de dissipation scalaire	T	s
δ_{ij}	Symbole de Kroenecker	–	–
δ_L	Épaisseur de flamme laminaire	L	m
δ_{reac}	Épaisseur du front de réaction	L	m
Δ_x	Taille de maille	T	s
$\dot{\omega}_k$	Terme source de l'espèce k	$M L^{-3} s^{-1}$	$kg m^{-3} s^{-1}$
$\dot{\omega}_T$	Taux de dégagement de chaleur thermique	$M L^{-1} T^{-3}$	$W m^{-3}$
η	Rendement thermodynamique	–	–
γ	Coefficient adiabatique	–	–
λ	Conductivité thermique	$M L T^{-3} \theta^{-1}$	$W m^{-1} K^{-1}$
ν	Viscosité cinématique	$L^2 T^{-1}$	m^2/s^{-1}
ν_t	Viscosité turbulente	$L^2 T^{-1}$	m^2/s^{-1}
Φ	Richesse du mélange air/carburant	–	–
Σ	Densité surfacique de flamme	L^{-1}	m^{-1}
τ_{AI}	Délai d'auto-inflammation	T	s
τ_{comp}	Taux de compression	–	–
τ_{flamme}	Temps de flamme	T	s
τ_{inj}	Durée d'injection du carburant pilote	T	s
τ_{mix}	Temps de mélange	T	s
τ_t	Temps intégral turbulent	T	s
$C_{p/v,k}$	Capacité thermique isobare/isochore de l'espèce k	–	–
$C_{p/v}$	Capacité thermique isobare/isochore moyenne	–	–

Opérateurs mathématiques

Description	Symbole	Dimension	Unité
∇	Opérateur gradient		
$\nabla \cdot$	Opérateur divergence		

Lettres Romaines

Description	Symbole	Dimension	Unité
\mathcal{D}_k	Diffusivité moléculaire de l'espèce k	$L^2 T^{-1} \theta^{-1}$	m^2/s
\mathcal{D}_T	Diffusivité thermique	$L^2 T^{-1} \theta^{-1}$	m^2/s
\mathcal{F}	Facteur d'épaississement	–	–
\mathcal{T}_{flamme}	Temps de flamme épaissie	T	s
\mathcal{W}	Masse moléculaire moyenne du mélange	M/N	kg/mol
\mathcal{W}_k	Masse moléculaire de l'espèce k	M/N	kg/mol
\tilde{c}	Variable de progrès totale filtrée (TKI-ECFM)	–	–
\tilde{c}_Σ	Variable de progrès filtrée liée à la déflagration (TKI-ECFM)	–	–
\tilde{c}_{AI}	Variable de progrès filtrée liée à l'AI (TKI-ECFM)	–	–

a	Vitesse du son	$L T^{-1}$	$m s^{-1}$
c	Variable de progrès	–	–
L_{spot}	Étendue du gradient de température	L	m
l_t	Échelle intégrale turbulente	L	m
$n_{C,k}$	Nombre d'atomes de carbone dans l'espèce k	–	–
Q'	Fluctuations d'une quantité Q	$L T^{-1}$	$m s^{-1}$
R	Constante des gaz parfaits	$M L^2 T^{-2} \theta^{-1} N^{-1}$	$kg m^{-2} s^{-2} K^{-1} mol^{-1}$
r_g	Constante spécifique des gaz parfaits	$L^2 T^2 \theta^{-1}$	$J kg^{-1} K^{-1}$
S_{AI}	Vitesse de déplacement d'un front d'auto-inflammation	$L T^{-1}$	$m s^{-1}$
S_d	Vitesse de déplacement d'un front de réaction	$L T^{-1}$	$m s^{-1}$
S_L	Vitesse de flamme laminaire	$L T^{-1}$	$m s^{-1}$
X_k	Fraction molaire de l'espèce k	–	–
Y_k	Fraction massique de l'espèce k	–	–
Z	Fraction de mélange		
Z_{MR}	Fraction de mélange la plus réactive (Most Reactive)		
Da	Nombre de Damköhler	–	–
Re	Nombre de Reynolds	–	–
Sc	Nombre de Schmidt	–	–

Remerciements

Je tiens en tout premier lieu à remercier les membres du jury pour avoir accepté de consacrer le temps et l'investissement nécessaire à l'évaluation de mon travail : Dr. Andreas Kempf et Dr. Arnaud Mura en tant que rapporteurs, Dr. Pascale Domingo et Fabien Lacroix en tant qu'examineurs. Les remarques tant sur le fond que sur la forme ont témoigné d'un intérêt certain pour mon travail, et m'ont touché personnellement.

J'adresse ma plus grande gratitude aux Dr. Stéphane Jay et Dr. Jean-Baptiste Michel pour m'avoir accompagné dans la réalisation de cette thèse de doctorat, nécessitant un encadrement de qualité, sur le plan des compétences scientifiques comme sur celui des qualités humaines.

Un grand merci au Dr. Stéphane Jay pour son flegme et sa vision d'ensemble, m'ayant apporté la prise de recul nécessaire pour aborder les difficultés plus sereinement. Ses connaissances scientifiques éminentes m'ont également offert un point d'appui décisif dans la mise en oeuvre des différentes approches de modélisation. En outre, sa bienveillance a été pour moi une source de confiance capitale pour la présentation de mes résultats et la rédaction du manuscrit, dans laquelle il a fourni un investissement remarquable.

Un grand merci au Dr. Jean-Baptiste Michel pour son humour et sa bonhomie, insufflant une énergie motrice considérable à la réalisation de ce travail de longue haleine. Son étonnante capacité d'analyse des phénomènes fondamentaux et son foisonnement d'idées sur les questions de modélisation m'ont apporté un nombre de pistes de réflexions incalculables. En outre, son expérience et son pragmatisme ont su m'orienter efficacement et m'éviter bien des fausses pistes au cours de ce travail de recherche.

Également, je tiens à adresser mes plus vifs remerciements au Dr. Olivier Colin, qui bien que ne faisant pas partie de l'encadrement "officiel", a contribué d'une façon non moins significative à la réalisation de ce travail. Ses connaissances scientifiques hors du commun et son inventivité sans pareille ont incontestablement apporté une plus-value significative au développement des différentes approches de modélisation.

Je tiens également à remercier chaleureusement le Dr. Gilles Bruneaux, pour sa bonne humeur, sa sympathie, sa disponibilité, et pour avoir contribué à la bonne ambiance au sein des directions R102, puis R116. J'adresse également une pensée particulière au Dr. Christian Angelberger qui a accepté de participer à mon jury de comité de suivi fin 2018. Nous n'avons malheureusement eu que rarement l'occasion d'échanger – faute à un changement de direction et à une crise sanitaire – mais sa sympathie était manifeste et appréciable. J'exprime également tous mes remerciements aux membres des directions R116 (anciennement R102), et R104, qui se sont toujours montrés serviables lorsque j'ai été amené à solliciter leur aide.

Je remercie l'ensemble des doctorants que j'ai côtoyés durant cette thèse, et notamment Mohamed A.C. pour m'avoir supporté en face de lui durant quasiment une année, en dépit de mon calme olympien lors des phases de débogage...!!! Je remercie également chaleureusement le Dr. Édouard Suillaud pour sa sympathie dès les premières semaines de thèse, avec qui je me suis lié d'amitié à travers d'innombrables conversations personnelles comme scientifiques, et à qui j'exprime toute mon estime.

Également, le soutien de mes amis a été pour moi une bouffée d'oxygène durant cette thèse. Je tiens à remercier mes deux compères Vincent H. et Pierre B. pour ces vacances à Ibiza été 2018, tant de fois narrées telles une odyssée, et qui m'ont laissé un souvenir inoubliable... Merci à Vincent D. pour ses sorties dans des lieux (presque) toujours recommandables et ses "balades" à vélo à un rythme digne du Tour de France. Merci à Amara M. (aka Aaron) pour nos sorties, éclats de rire, et pour avoir maintes fois eu la patience de m'écouter refaire le monde – toujours une bière à la main – posé sur les quais du barrage de Saint-Maurice... Merci à Ashkan T. pour être ô

combien de fois venu me voir à Paris depuis Fort Fort Lointain et avec qui j'ai partagé des fous rires me permettant de faire le vide, notamment durant la rédaction. Merci enfin à Thibault C. et Antoine A. pour nos sorties resto, vélo, et karting, toujours teintées d'un talent organisationnel éblouissant!!!

Enfin, et surtout...surtout... j'adresse un incommensurable merci à ma famille, et plus spécialement à mes parents m'ayant inlassablement apporté un soutien inestimable, et ce malgré mes humeurs, me permettant de surmonter mes interrogations, mes doutes, mes craintes... Cela aura indubitablement été un élément clef dans l'accomplissement de ce travail, et c'est à eux – et particulièrement à ma mère – que je dédie cet achèvement.

Table des Matières

	Page
I Combustion Dual-Fuel : État de l’art, Généralités, Problématiques	1
1 Introduction	3
1.1 Le moteur à allumage commandé	3
1.2 Le moteur Diesel	4
1.3 Rendement des différents cycles	5
1.4 Axes de recherches actuels	6
1.5 Caractéristiques physico-chimiques des carburants	6
1.6 Le moteur <i>Dual-Fuel</i>	8
1.6.1 Principe de fonctionnement	8
1.6.2 Rendement et émissions polluantes	9
1.6.3 Applications <i>Dual-Fuel</i> industrielles	11
1.7 Objectifs de la thèse	13
1.8 Organisation du manuscrit	13
2 Transition AI→déflagration	15
2.1 Outils théoriques pour la transition AI→déflagration	15
2.2 Travaux expérimentaux	21
2.3 Travaux numériques	22
2.4 Conclusions du chapitre	30
II Transition AI→déflagration : Étude fondamentale et Éléments de modélisation	31
3 Approches de modélisation de la combustion Dual-Fuel	33
3.1 Équations de l’Aérothermochimie	33
3.1.1 Conservation des espèces	34
3.1.2 Conservation de la quantité de mouvement	34
3.1.3 Conservation de l’énergie totale	34
3.2 Équations de la LES	34
3.2.1 Opérations de filtrage	35
3.2.2 Filtrage LES des équations de l’aérothermochimie	35
3.2.3 Fermeture des flux diffusifs	35
3.3 Modèles de flamme turbulente	35
3.3.1 Régime des flammelettes	35
3.3.2 Modèles de flammelettes	36
3.3.2.1 <i>G</i> -équation	36
3.3.2.2 ECFM	37
3.3.3 Modèle de flamme épaissie (TFM - (<i>Thickened Flame Model</i>))	41
3.3.3.1 Principe	41

3.3.3.2	Formulation standard	42
3.3.3.3	Formulation dynamique	42
3.3.3.4	Formulation dynamique de Jaravel	43
3.3.3.5	Équations du modèle TFM	44
3.3.3.6	Limitations	44
3.4	Modèles d'auto-inflammation	45
3.4.1	Approches à chimie homogène	45
3.4.1.1	TKI	45
3.4.1.2	FPI	45
3.4.1.3	SAGE	46
3.4.2	Approches à chimie hétérogène	46
3.4.2.1	CMC	46
3.4.2.2	RIF	46
3.4.2.3	ADF	46
3.4.3	Couplage TKI-ECFM	47
3.4.3.1	Découplage des variables d'avancement	47
3.4.3.2	Application à des configurations <i>Dual-Fuel</i>	48
3.5	Conclusions du chapitre	51
4	Transition AI → déflagration, étude fondamentale	53
4.1	Étude préliminaire mono-carburant	53
4.1.1	Hypothèses simplificatrices	53
4.1.2	Code de calcul	54
4.1.3	Maillage	54
4.1.4	Conditions initiales	54
4.1.5	Schéma réactionnel	55
4.1.6	Méthodologie de post-traitement	55
4.1.6.1	Bilan diffusion/réaction	56
4.1.6.2	Vitesse de consommation	56
4.1.6.3	Variable de progrès	56
4.1.6.4	Vitesse de déplacement	57
4.1.6.5	L'épaisseur du front de réaction	59
4.1.7	Résultats en configuration mono-carburant	59
4.1.7.1	Cas A : conditions sans transition vers la déflagration	59
4.1.7.2	Cas B et D : conditions avec observation de la transition vers la déflagration	60
4.1.7.3	Cas C	62
4.1.8	Analyse phénoménologique	65
4.1.8.1	Épaisseur du front de réaction	65
4.1.8.2	Bilan diffusion/réaction	65
4.1.8.3	Vitesse de déplacement	66
4.1.9	Synthèse des phénomènes pilotant la transition AI→déflagration en conditions mono-carburant	67
4.1.10	Évaluation de la validité de la théorie de Zeldovich	67
4.1.11	Validité des critères de comparaison des vitesses S_d vs S_{AI} vs S_L	71
4.2	Étude <i>Dual-Fuel</i>	73
4.2.1	Code de calcul	73
4.2.2	Maillage	73
4.2.3	Conditions initiales	73
4.2.4	Schéma réactionnel	74
4.2.5	Méthodologie de post-traitement	75
4.2.5.1	Variable de progrès	76

4.2.5.2	Vitesse de déplacement S_d	77
4.2.6	Résultats en configuration <i>Dual-Fuel</i>	77
4.2.6.1	Analyse du taux de dégagement de chaleur pour les différents cas	78
4.2.6.2	Analyse du bilan diffusion/réaction	78
4.2.6.3	Influence du taux de dissipation scalaire sur l'AI	79
4.2.6.4	Analyse de la vitesse de déplacement	80
4.2.6.5	Analyse de l'épaisseur du front de réaction	84
4.3	Classification des différents cas	85
4.4	Conclusions du chapitre	86
5	Modélisation de la transition AI→déflagration en conditions Dual-Fuel simplifiées	87
5.1	Description des cas d'étude	87
5.2	Constats de l'étude fondamentale 1D	88
5.3	Approche à chimie tabulée TKI-ECFM	89
5.3.1	Modélisation du dépôt de surface de flamme	89
5.3.2	Évaluation des approches TKI et TKI-ECFM	89
5.3.2.1	Description de l'AI	89
5.3.2.2	Description de la flamme pré-mélangée	90
5.3.3	Conclusions de l'approche TKI-ECFM	95
5.4	Approche <i>no-model</i> à chimie résolue : Potentiels et difficultés	96
5.4.1	Description de l'AI	96
5.4.2	Description de la propagation de flamme pré-mélangée	96
5.4.3	Conclusions de l'approche <i>no-model</i> à chimie résolue	98
5.5	Approche à modèle de flamme épaissie (TFM - <i>Thickened Flame Model</i>)	99
5.5.1	Paramétrisation du modèle TFM sur une flamme canonique 1D	99
5.5.2	Évaluation du modèle TFM-M0	100
5.5.3	Formulation d'un modèle portant sur le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} : TFM-M1	102
5.5.4	Évaluation du modèle TFM-M1	105
5.5.4.1	Grandeurs moyennes	105
5.5.4.2	Influence du modèle sur le bilan diffusion/réaction à l'allumage	108
5.5.4.3	Conclusions des modèles TFM-M0 et TFM-M1	111
5.5.5	Formulation de modèles portant sur l'indicateur de flamme ψ : TFM-M2 et TFM-M2 _{destr}	112
5.5.5.1	TFM-M2	112
5.5.5.2	TFM-M2 _{destr}	118
5.5.6	Évaluation des modèles TFM-M2 et TFM-M2 _{destr}	124
5.5.6.1	Grandeurs moyennes	124
5.5.6.2	Influence du maillage	128
5.5.6.3	Influence du paramètre de relaxation $\mathcal{R}_{flametime}$	130
5.5.6.4	Robustesse des modèles M2 et M2 _{destr} pour représenter la transition AI→déflagration	132
5.5.6.5	Conclusions des modèles TFM-M2 et TFM-M2 _{destr}	139
5.5.7	Conclusions de l'approche à modèle de flamme épaissie	140
5.6	Conclusions du chapitre	141
III	Transition AI→déflagration : Évaluation des modèles en configurations Dual-Fuel académiques et industrielles	143
6	Application des modèles en configuration Dual-Fuel académique	145
6.1	Présentation du banc d'essais	145
6.2	Méthodes de métrologie	147
6.2.1	Taux de dégagement de chaleur	147

6.2.2	Richesse (TMPD-PLIF)	147
6.2.3	Chimie de flamme froide (CH_2O -PLIF)	148
6.2.4	Chimie de flamme chaude (chimiluminescence OH^*)	148
6.3	Configuration numérique	148
6.3.1	Maillage	148
6.3.2	Conditions initiales	149
6.3.3	Conditions d'opération	149
6.3.4	Conditions aux limites	150
6.3.4.1	Flux pariétaux	150
6.3.4.2	Volumétrie	151
6.3.5	Loi d'état	151
6.3.6	Phase liquide	151
6.3.6.1	Paramètres d'injection	151
6.3.6.2	Traînée aérodynamique	152
6.3.6.3	Atomisation du jet	152
6.3.6.4	Évaporation du jet	153
6.3.7	Turbulence	154
6.3.8	Qualité de la LES	154
6.4	Calage en conditions non-réactives	155
6.4.1	Pression	155
6.4.2	Pénétration du jet pilote gazeux	156
6.4.3	Richesse	156
6.5	Évaluation des différents modèles de combustion en conditions réactives	158
6.5.1	Calcul <i>no-model</i> , point de référence pour l'AI	158
6.5.1.1	Comportement global	158
6.5.1.2	Caractéristiques du mélange	159
6.5.1.3	Étude <i>a priori</i> sur l'AI	160
6.5.2	Calcul TFM-M0, difficultés à représenter la transition AI→déflagration	161
6.5.2.1	Comportement global	161
6.5.2.2	Comportement du modèle	162
6.5.3	Calcul TFM-M2 _{destr} , apport d'une modélisation de la transition AI→déflagration	164
6.5.3.1	Comportement global	164
6.5.3.2	Comportement du senseur de réaction \mathcal{S}_{NF}	166
6.5.3.3	Comportement du senseur final \hat{S}	167
6.5.3.4	Comportement de l'indicateur de gaz brûlés $\psi_{burntgas}$	168
6.5.3.5	Comportement du paramètre de sensibilité β	169
6.5.3.6	Comportement du facteur d'épaississement \mathcal{F}	169
6.5.3.7	Transition AI→déflagration analysée par l'indice de Takeno	170
6.5.3.8	Influence du maillage sur la transition AI→déflagration	171
6.5.4	Comparaison des calculs <i>no-model</i> , TFM-M0 et TFM-M2 _{destr}	173
6.5.5	Calcul TKI-ECFM, capacité à représenter la transition AI→déflagration	174
6.5.5.1	Comportement global	174
6.5.5.2	Transition de TKI vers ECFM	175
6.5.5.3	Influence du maillage	177
6.5.6	Discussions TKI-ECFM vs TFM-M2 _{destr} en configuration <i>Dual-Fuel</i> académique	178
6.6	Comparaison numérique/expérimental	180
6.6.1	Grandeurs globales	180
6.6.2	Signaux de chimiluminescence	182
6.7	Conclusions du chapitre	186

7	Vers une application moteur	187
7.1	Présentation du cas ICAMDAC	187
7.1.1	Conditions aux limites	188
7.1.2	Conditions initiales	188
7.1.3	Point de fonctionnement	189
7.2	Comportement global	189
7.3	Comportement du modèle TFM-M2 _{destr}	191
7.4	Conclusions de l'approche TFM-M2 _{destr} sur un cas moteur <i>Dual-Fuel</i>	195
IV	Conclusions et Perspectives	197
8	Conclusions globales et perspectives	199
8.1	Étude fondamentale de la transition AI→déflagration	199
8.2	Modélisation LES de la transition AI→déflagration en configuration simplifiée 1D	200
8.3	Évaluation des approches de modélisation en configuration LES 3D <i>Dual-Fuel</i>	201
8.4	Évaluation du modèle TFM-M2 _{destr} en conditions moteur	202
8.5	Perspectives	203
A	Annexe A	205
	Bibliographie	211

Première partie

Combustion *Dual-Fuel* : État de l'art, Généralités,
Problématiques

Introduction

À travers le monde, 70% de la consommation de pétrole brut journalière est consacrée à l'utilisation de moteurs à combustion interne [93]. Cependant, malgré la pression grandissante qui pèse sur eux de par le contexte écologique, la grande majorité des véhicules terrestres actuels utilise des technologies dont le principe a peu évolué depuis leur invention : le moteur à allumage commandé (communément appelé moteurs à essence), et le moteur Diesel également appelé moteur à allumage par compression. En effet, peu de technologies alternatives à ces dernières ont été prouvées viables. Néanmoins, le moteur Dual-Fuel, dont le fonctionnement est connexe avec celui des moteurs Diesel et essence, a prouvé son applicabilité en situation réelle, et est depuis une dizaine d'année sujet de nombreux développements et investigations. Premièrement, le fonctionnement des moteurs Diesel, essence, ainsi que la technologie Dual-Fuel sont détaillés. Deuxièmement, les principales caractéristiques physico-chimiques des carburants conventionnels, et les propriétés nécessaires à la compréhension de la combustion Dual-Fuel sont brièvement présentées. Enfin, les objectifs principaux de cette thèse ainsi que l'organisation du manuscrit sont détaillés.

1.1 Le moteur à allumage commandé

Le moteur à allumage commandé inventé à la fin du XIX^{eme} siècle représente à l'heure actuelle 80% des véhicules en circulation dans le monde. Son fonctionnement se déroule en quatre temps :

La phase d'admission : Un mélange air/carburant est introduit dans la chambre durant la descente du piston vers le point mort bas (PMB).

La phase de compression : Le piston remonte jusqu'au point mort haut et comprime le mélange, faisant augmenter la pression et la température dans la chambre.

La phase de détente : Le mélange est allumé par l'intermédiaire d'une bougie. Un front de flamme pré-mélangée turbulent se propage à travers la chambre durant la descente du piston, ce qui fait augmenter la température et la pression et fournit le travail mécanique nécessaire au fonctionnement du moteur.

La phase d'échappement : Le piston remonte dans la chambre et expulse les gaz brûlés vers la tubulure d'échappement.

Avantages

Le moteur à allumage commandé met en jeu la combustion d'une charge pré-mélangée et proche de la stœchiométrie. Ces caractéristiques sont peu propices à la formation de suies, généralement produites en mélange riche Fig.1.3. De même, le contrôle de la composition présente dans la chambre (notamment via une sonde lambda disposée dans le conduit d'échappement) rend le moteur à essence compatible avec des systèmes de post-traitement

des gaz d'échappement relativement simples et au coût raisonnable. Le catalyseur trois voies intégré au système d'échappement permet ainsi une réduction significative des émissions d'oxydes d'azote (NOx), de monoxyde de carbone (CO), et d'hydrocarbures imbrûlés (HC) par un procédé d'oxydoréduction.

Inconvénients

Le moteur à allumage commandé présente néanmoins des inconvénients principalement liés aux combustions anormales rendant leur conception et mise au point parfois délicate. Le cliquetis est décrit pour la première fois en 1882 comme un "ennemi persistant et importun" [24], et se caractérise par l'apparition de noyaux d'AI au sein des gaz frais en amont du front de flamme (également appelés end gas). Dans certains cas, l'apparition de ces noyaux d'AI peut même survenir avant l'allumage par bougie, générant un pré-allumage. L'allumage n'est alors plus uniquement piloté par la bougie, mais aussi par la cinétique réactionnelle dans les end gas. Le cliquetis se manifeste alors par la propagation d'un front d'AI pouvant, selon les conditions thermodynamiques en chambre, générer des ondes acoustiques capables de détruire les parois du moteur [51]. On parle alors de super-cliquetis. Les hauts niveaux de pression/température sont généralement propices à l'apparition du cliquetis.

Pour lutter contre ce phénomène, les taux de compression sont alors plafonnés (à des valeurs de ordre de 10 : 1 à 12 : 1), et l'allumage aux points de fonctionnement considérés à risques est retardé afin de limiter les niveaux pression/température en chambre. Cependant, le rendement thermodynamique du cycle est directement lié au taux de compression τ_{comp} , et sa limitation - pour éviter le cliquetis - pénalise le rendement thermodynamique $\eta_{essence}$ du moteur à essence Eq.(1.1).

Les carburants à indice d'octane élevé sont choisis pour le moteur à allumage commandé, car leur forte résistance à l'AI diminue la probabilité d'apparition du cliquetis.

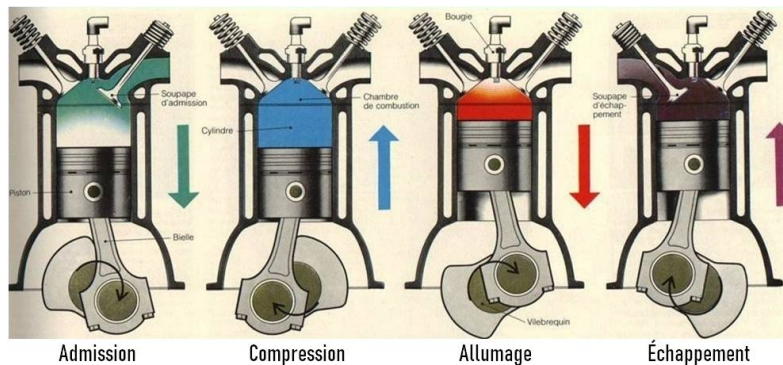


FIGURE 1.1 – Schéma du cycle de fonctionnement d'un moteur 4 temps à allumage commandé.

1.2 Le moteur Diesel

Le moteur Diesel se différencie principalement du moteur à allumage commandé par les phases d'admission et d'allumage, et par le régime de combustion qu'il met en jeu. Contrairement au moteur à essence qui admet un mélange air/carburant, le moteur Diesel admet uniquement de l'air dans certains cas accompagné de gaz brûlés recirculés (EGR - Exhaust Gaz Recirculation). À proximité du point mort haut, l'injection d'un carburant fortement réactif dans des conditions de pression/températures élevées permet l'AI d'un mélange air/carburant turbulent et hétérogène. La combustion se déroule essentiellement par AI et flamme de diffusion, contrairement au moteur à essence mettant en jeu une propagation de flamme pré-mélangée. Les carburants à indice de cétane élevé sont choisis pour le moteur Diesel, car leur forte propension à l'AI favorise la combustion du mélange nécessaire au fonctionnement du moteur.

Avantages

L'avantage du moteur Diesel réside principalement dans son rendement η_{Diesel} . La phase de compression implique uniquement des gaz non-réactifs (air ou air+EGR), et est par définition invulnérable au risque de pré-

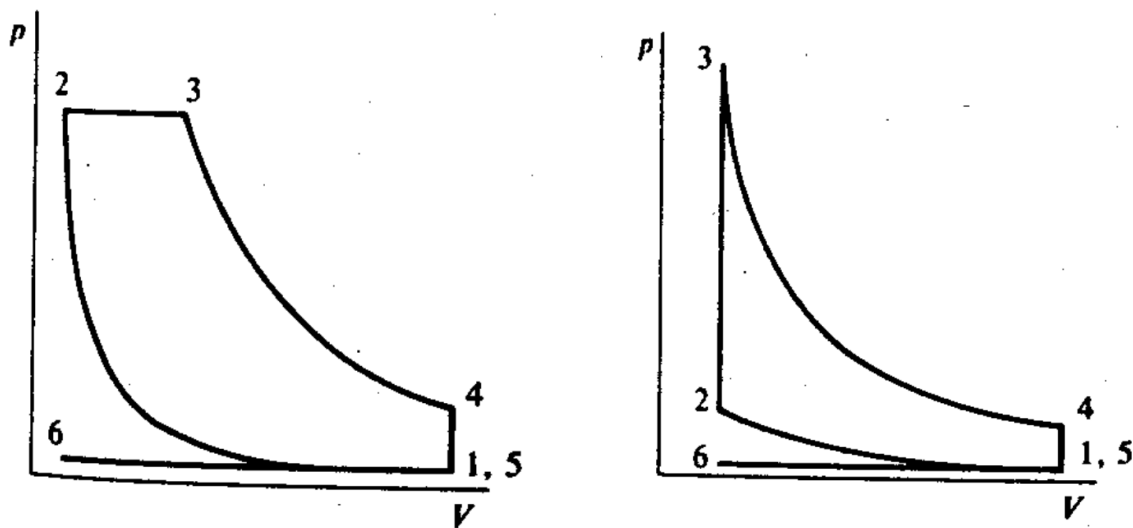
allumage par AI connu par le moteur à essence, de même qu'aux phénomènes de cliquetis et super-cliquetis. De fait, les taux de compression rencontrés en moteur Diesel sont sensiblement plus élevés (de l'ordre de 16 : 1 à 20 : 1), en faveur du rendement thermodynamique Eq.(1.2). La combustion d'un mélange hétérogène globalement pauvre participe également à la faible consommation de carburant associée à ce type de moteurs.

Inconvénients

La combustion Diesel se déroule en milieu fortement hétérogène, couvrant à la fois des zones riches, pauvres, et stœchiométriques. Cependant, les zones riches sont propices à la production d'hydrocarbures imbrûlés, et précurseurs de suies Fig.1.3, et les zones stœchiométriques (où les niveaux de température atteints sont les plus élevés), favorisent la réaction entre l'azote et l'oxygène présents dans l'air (*NO* thermique) et produisent des NOx, polluant hautement toxique. Le *NO* thermique est le principal processus de formation des NOx en moteur Diesel [44]. Une stratégie communément utilisée pour contourner ce désavantage existe toutefois : la recirculation de gaz brûlés (EGR). La dilution par des produits de combustion, induit une réduction de la température maximale atteinte dans la chambre, et permet une réduction significative de la production de NOx [74]. Cette stratégie nuit toutefois au rendement moteur.

1.3 Rendement des différents cycles

Les moteurs essence et Diesel obéissent à des cycles thermodynamiques différents Fig.1.2. À taux de compression identique, le rendement moteur essence est intrinsèquement supérieur à celui du moteur Diesel, voir Eq.(1.1) et Eq.(1.2). Néanmoins, ce désavantage est largement surcompensé par les valeurs de τ_{comp} appliquées aux moteurs Diesel, bien plus élevées que celles rencontrées en moteurs à allumage commandé. En pratique, le moteur Diesel peut atteindre des rendements supérieurs à 50%, contre des valeurs de l'ordre de 40% pour le moteur à allumage commandé, aux points optimaux de fonctionnement.



(a) Cycle thermodynamique idéal d'un moteur Diesel.

1 → 2 : Compression isentropique ;

2 → 3 : Combustion isobare ;

3 → 4 : Détente isentropique.

Les étapes 6 → 1 et 4 → 5 → 6 représentent respectivement l'admission et l'échappement : Évolution isochore

(b) Cycle thermodynamique idéal d'un moteur Diesel.

1 → 2 : Compression isentropique ;

2 → 3 : Combustion isochore ;

3 → 4 : Détente isentropique.

Les étapes 6 → 1 et 4 → 5 → 6 représentent respectivement l'admission et l'échappement : Évolution isochore

FIGURE 1.2 – Cycles théoriques des moteurs Diesel et essence en coordonnées $P - V$. Repris de Heywood [43].

$$\eta_{essence} = 1 - \frac{1}{\tau_{comp}^{\gamma-1}} \quad (1.1)$$

$$\eta_{Diesel} = 1 - \frac{1}{\tau_{comp}^{\gamma-1}} \left[\frac{\beta^\gamma - 1}{\gamma(\beta - 1)} \right] \quad (1.2)$$

1.4 Axes de recherches actuels

Les technologies de type LTC (Low Temperature Combustion), englobent notamment les moteurs HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) et PCCI (Premixed Charge Compression Ignition), et Dual-Fuel (ou RCCI - Reactivity Controlled Compression ignition) et comptent parmi les principaux axes de recherche actuels. Ces technologies visent un fonctionnement du moteur à basse température grâce à une charge pauvre permettant d'atteindre de hauts rendements (moins d'énergie perdue par transferts thermiques pariétaux), mais aussi de faibles émissions polluantes (suies, NOx) [104]. En effet, les plages de fonctionnement de ces différentes technologies en coordonnées $\phi - T$, se trouvent majoritairement en dehors des zones propices à la création des suies et des NOx Fig.1.3.

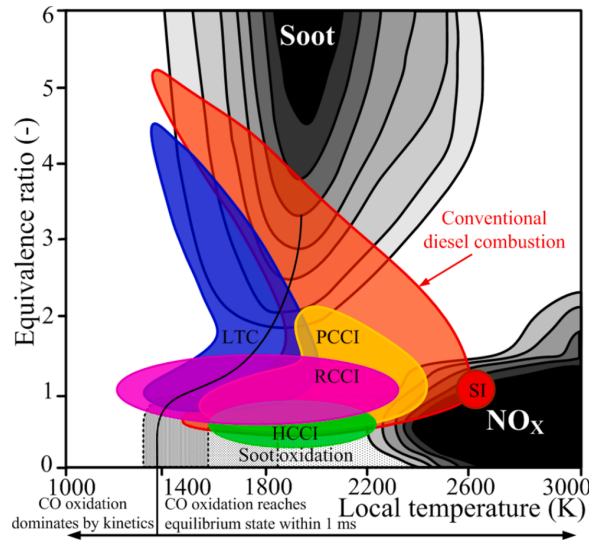


FIGURE 1.3 – Cartographie ϕ - T des zones favorables à l'apparition des suies et des NOx. Les régions indiquées correspondent aux plages de fonctionnement de différentes technologies existantes aujourd'hui. Repris de Duan *et al.* [32].

1.5 Caractéristiques physico-chimiques des carburants

Les carburants les plus utilisés à l'heure actuelle sont composés de chaînes carbonées de type C_nH_m , dont les propriétés varient d'une espèce à l'autre. Ainsi, les carburants mettant en jeu des chaînes carbonées courtes ont une forte/faible proportion de liaisons $C - H/C - C$ et une propension à l'auto-inflammation (AI) plus faible (i.e. des délais d'AI longs). Les carburants mettant en jeu des chaînes carbonées longues ont une plus faible/forte proportion de liaisons $C - H/C - C$ et une propension à l'AI forte (i.e. délais d'AI plus courts). Les travaux expérimentaux de Burcat *et al.* [18], basés sur des alcanes allant de CH_4 à C_5H_{12} montrent notamment que les délais d'AI varient globalement de façon proportionnelle au rapport H/C (exception faite de C_2H_6) Fig.1.4. Cela est attribué au fait que les liaisons $C - C$ sont moins énergétiques que les liaisons $C - H$ et se brisent à partir d'un niveau d'excitation thermique moins important, d'où un emballement thermique plus rapide et des délais d'AI plus courts.

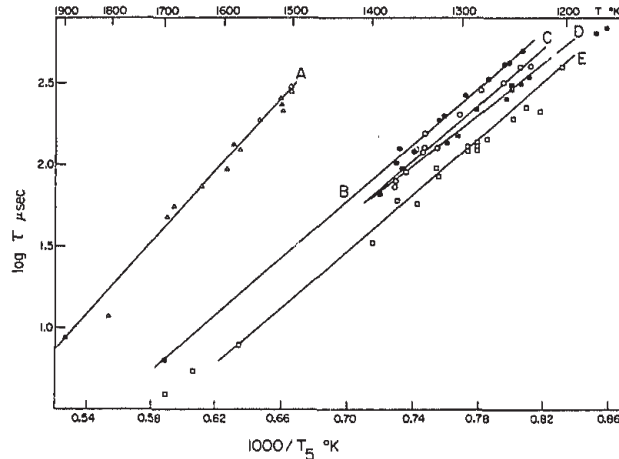
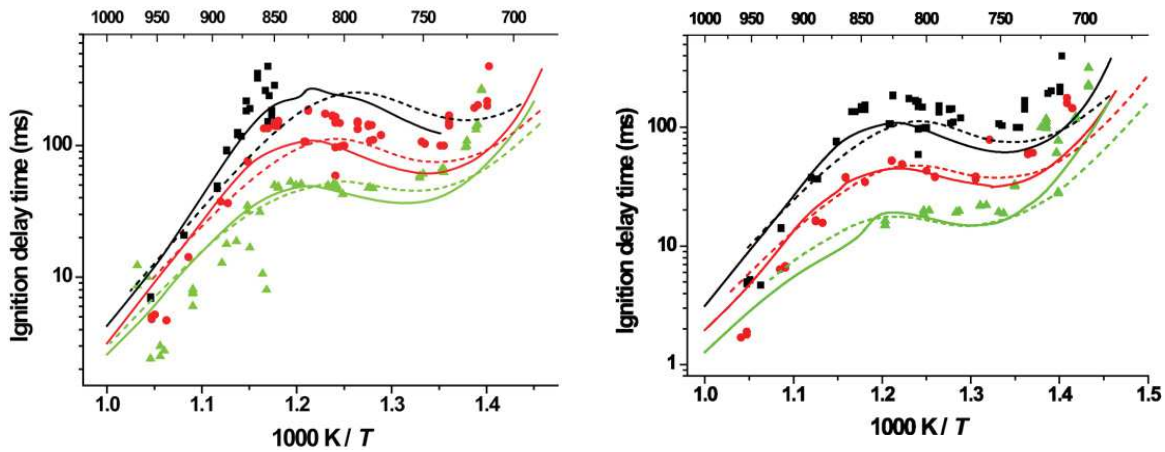


FIGURE 1.4 – Délais d'AI pour différents mélanges air/carburant stœchiométriques (fraction molaire) : A = 7.7% CH_4 + 15.4% O_2 ; B = 3.22% C_3H_8 + 16.1% O_2 ; C = 2.5% C_4H_{10} + 16.25% O_2 ; D = 2.04% C_5H_{12} + 16.3% O_2 ; E = 4.54% C_2H_6 + 15.91% O_2 . Les chaînes carbonées les plus longues entraînent les délais d'AI les plus courts, à l'exception de C_2H_6 . Repris de Burcat *et al.* [18].



(a) Effet de la pression sur les délais d'AI d'un mélange air/propane à richesse $\phi = 0.5$. Les symboles désignent les résultats expérimentaux.
 ■ : $P = 21$ atm ; ● : $P = 27$ atm ; ▲ : $P = 37$ atm.
 Les lignes continues et discontinues représentent les résultats issus de deux codes de simulation 0D avec/sans échanges thermiques.

(b) Effet de la richesse sur les délais d'AI d'un mélange air/propane pression $P = 30$ bar. Les symboles désignent les résultats expérimentaux.
 ■ : $\phi = 0.5$; ● : $\phi = 1.0$; ▲ : $\phi = 2.0$.
 Les lignes continues et discontinues représentent les résultats issus de deux codes de simulation 0D avec/sans échanges thermiques.

FIGURE 1.5 – Délais d'AI d'un mélange air/propane pour différentes conditions de température/richesse/pression. Repris de Gallagher *et al.* [36]. Le phénomène de NTC apparaît globalement entre 750K et 850K.

En outre, les délais d'AI sont globalement inversement proportionnels à la température du mélange. Cependant, cette tendance n'est pas monotone car sur une plage de température spécifique au carburant et aux conditions de pression/composition, les délais d'AI augmentent avec la température. Cette zone est appelée NTC (Negative Temperature Coefficient). Une étude expérimentale (machine à compression rapide) et numérique (code 0D) pour divers mélanges air/propane menée par Gallagher *et al.* [36] met clairement en évidence la zone NTC Fig.1.5.

En pratique, la résistance d'un carburant à l'AI est représentée par l'indice d'octane. Plus l'indice d'octane est élevé, plus la résistance à l'AI d'un carburant est forte (délais d'AI longs). À l'inverse, l'indice de cétane représente la propension à l'AI d'un carburant. Plus l'indice de cétane est élevé, plus la propension à l'AI du carburant est forte (délais d'AI courts). Les carburants à fort indice d'octane sont rencontrés en moteur à allumage commandé, tandis que les carburants à fort indice de cétane sont rencontrés en moteur Diesel. L'indice d'octane d'un carburant essence est usuellement de l'ordre de 100, et l'indice de cétane d'un carburant Diesel est proche de 50.

1.6 Le moteur *Dual-Fuel*

1.6.1 Principe de fonctionnement

Le moteur Dual-Fuel fait partie des technologies LTC (Low Temperature Combustion) et implique l'utilisation de deux carburants aux propriétés de réactivité distinctes. Ces carburants sont usuellement : (i) du gaz naturel essentiellement composé de méthane (charge principale) et présentant une forte résistance à l'AI (indice d'octane élevé d'environ 120, contre environ 100 pour de l'essence) idéal pour un moteur à allumage commandé car peu favorable à l'apparition du cliquetis, (ii) du gazole présentant une forte propension à l'AI (indice de cétane élevé) idéal pour un moteur Diesel car favorable l'allumage du mélange. Le moteur Dual-Fuel, peut alors être considéré comme une hybridation entre un moteur à allumage commandé, et un moteur Diesel. À noter que le moteur Dual-Fuel peut fonctionner avec d'autres carburants que le couple gazole/gaz naturel, dès lors que ceux-ci présentent un fort écart de réactivité. De faibles émissions de NOx et de suies ainsi que des niveaux de rendement élevés sont souvent rapportés, et valent au moteur Dual-Fuel d'être considéré comme une technologie prometteuse.

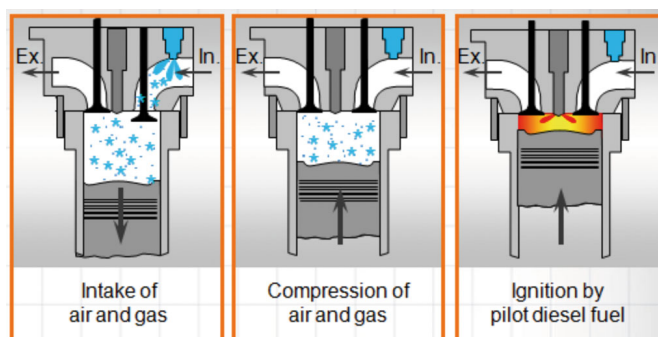


FIGURE 1.6 – Principe de fonctionnement du moteur *Dual-Fuel*.

Ainsi, durant la phase d'admission un mélange air/carburant M_1 pauvre à indice d'octane élevé (souvent du gaz naturel) est introduit dans le cylindre. Ce mélange possède une forte résistance à l'AI, permettant d'appliquer des taux de compression élevés à l'avantage du rendement thermodynamique, tout en limitant les risques de cliquetis associés aux hauts niveaux de température et de pression rencontrés. Au voisinage du point mort haut (PMH), un carburant pilote à cétane élevé (souvent du gazole) est injecté. Ce dernier s'évapore et se disperse à travers le mélange homogène M_1 pour former localement un mélange M_2 fortement stratifié en composition et réactivité. La forte réactivité du carburant pilote génère alors des noyaux d'AI à travers la chambre et entraîne un allumage dispersé. La combustion propage des zones les plus réactives vers les moins réactives. La charge pré-mélangée fournit l'essentiel du travail moteur puisque le carburant pilote représente généralement environ 10% à 30% de l'apport énergétique global du moteur [55, 57, 131].

Diverses études phénoménologiques ont été menées autour de l'allumage d'un mélange homogène air/carburant par l'injection d'un spray pilote, ainsi que l'interaction entre la charge principale à octane élevé, et le carburant pilote à cétane élevé. Ainsi, il est souvent rapporté dans la littérature que le méthane possède un caractère inhibiteur sur l'AI initiée par l'injection pilote, et entraîne une forte augmentation des délais d'AI par rapport à un fonctionnement Diesel usuel. Les travaux de Belaid [11] basés sur des mesures expérimentales acquises sur un banc mono-cylindre de recherche comparent notamment deux couples de carburants, et révèlent un retard à l'AI des configurations méthane/gazole par rapport aux cas méthane/iso-octane Fig.1.10a. Cela corrobore les tendances rapportées par Salaun et al. [135] et Schlatter et al. [105]. Les travaux expérimentaux de Srna [115] effectués sur une machine à compression rapide Dual-Fuel n-dodécane/méthane vont également dans ce sens puisque l'augmentation de la richesse de la charge principale air/méthane s'accompagne d'un allongement des délais d'AI, mettant en évidence le rôle inhibiteur du méthane Fig.1.10c.

1.6.2 Rendement et émissions polluantes

Travaillant à richesse globale pauvre, le moteur Dual-Fuel fait partie des technologies LTC, et permet des rendements similaires, voir supérieurs au moteur Diesel.

Les expériences de Splitter et al. [114] étudient le rendement d'un moteur mono-cylindre Diesel de recherche, adapté pour une combustion Dual-Fuel. La charge principale est composée de E85 (85% d'éthanol, 15% d'essence) et le carburant pilote est de l'essence enrichie en 2-ethylhexyl nitrate afin d'accroître la réactivité du mélange. Des rendements thermodynamiques proches de 60% sont atteints et des émissions de NOx et de particules fines proches de zéro sont rapportées par les auteurs. Une étude comparant les technologies HCCI et Dual-Fuel menée par Inagaki et al. [47] rapporte des rendements thermodynamiques de l'ordre de 50%, et souligne la meilleure contrôlabilité du moteur Dual-Fuel due à la possibilité de piloter l'allumage par l'injection pilote. Les carburants à indice d'octane/cétane élevés sont respectivement de l'iso-octane et du gazole. Les émissions de NOx et de suies sont faibles, tandis que les émissions d'imbrûlés et de CO sont cependant supérieures à celles d'un moteur Diesel. Similairement, des rendements d'environ 40% sont rapportés par Yu et al. [133], et une étude paramétrique du rapport massique des deux carburants révèle toutefois que la proportion en carburant à octane élevé (essence) joue un rôle essentiel dans les émissions d'imbrûlés. Ces émissions sont attribuées à des effets d'extinction de flamme aux parois, et s'amplifient lorsque la richesse de la charge principale (essence) augmente. Cependant, les travaux numériques de Yang et al. [127] effectués en configuration Dual-Fuel essence/gazole suggèrent qu'une diminution de la proportion en essence (charge principale) augmente la production de suies en raison de phénomènes d'extinction de flamme plus généralisés, mais diminue la production de NOx en raison de températures de fin de combustion plus faibles défavorables à leur formation Fig.1.8. Les expérimentations menées par Duffour et al. [33] en configurations Dual-Fuel essence/gazole suggèrent un rapport massique "optimal" de carburant essence (charge principale) compris entre 70% et 85% selon le point de fonctionnement. L'étude révèle des rendements proches d'un moteur Diesel à faible charge, et proches de ceux d'un moteur à essence pour des charges supérieures, et de faibles niveaux de NOx sont relevés sur l'ensemble des conditions d'opération testées.

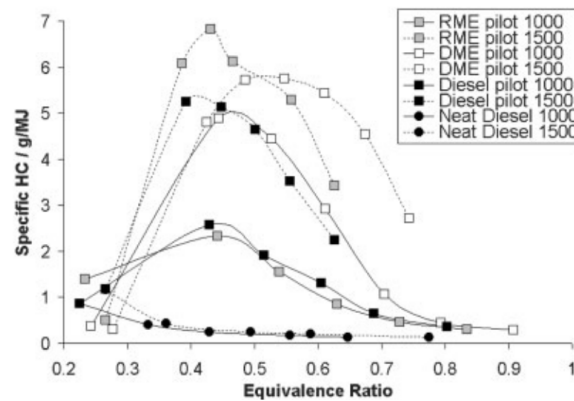


FIGURE 1.7 – Évolution de la masse d'imbrûlés (en g/MJ) en fonction de la richesse en méthane de la charge principale. "RME pilot", "DME pilot", et "Diesel pilot" réfèrent respectivement à une injection pilote à base d'ester méthylique de colza (biodiesel), de diméthyléther, et de gazole, tandis que 1000 et 1500 réfèrent au régime moteur. "Neat Diesel" réfère à un fonctionnement Diesel classique. Repris de Namasivayam *et al.* [78].

Les expériences de Liu et al. [59] en configuration Dual-Fuel gaz naturel/gazole révèlent qu'environ 90% de la masse d'imbrûlés provient du gaz naturel. Les émissions d'imbrûlés sont attribuées à une propagation de flamme insuffisante/absente à travers la charge principale, et plus spécialement en mélange pauvre, comme suggéré par Namasivayam et al. [78] Fig.1.7. À noter que les émissions d'imbrûlés surviennent préférentiellement dans des configurations utilisant du méthane comme charge principale, dû à sa faible réactivité. Les investigations numériques de Yousefi et al. [132] opérées en configuration gaz naturel/gazole révèlent qu'une augmentation de l'avance à l'injection permet une réduction significative des émissions de méthane imbrûlé. Cela s'accompagne cependant d'une augmentation des émissions de NOx. Ces dernières peuvent cependant être mitigées par l'usage d'EGR comme montré par Yang et al. [127] sans systématiquement augmenter les émissions de suies ni impac-

ter significativement le rendement thermodynamique Fig.1.8. Les travaux de Papagiannakis et al. [83] effectués en configuration méthane/gazole sont typiques des tendances généralement observées en technologie Dual-Fuel Fig.1.9.

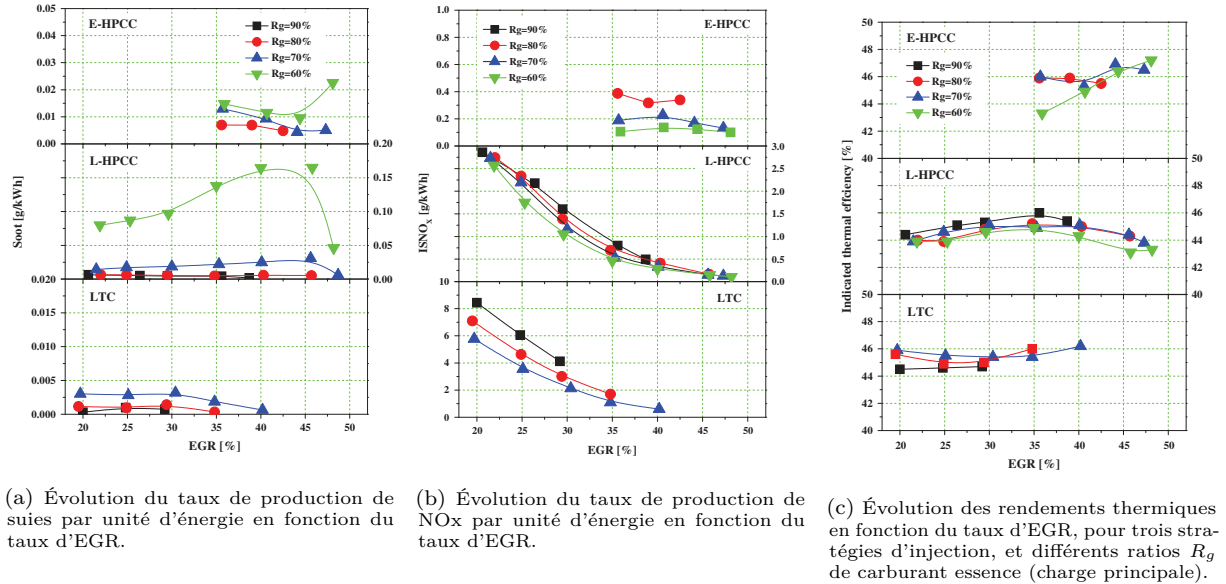


FIGURE 1.8 – Émissions et rendement en fonction du taux d'EGR pour trois stratégies d'injection : L-HPCC, E-HPCC et LTC (*Early/Late Highly Premixed Charge Combustion* et *Low Temperature Combustion*). Repris de Yang *et al.* [127]

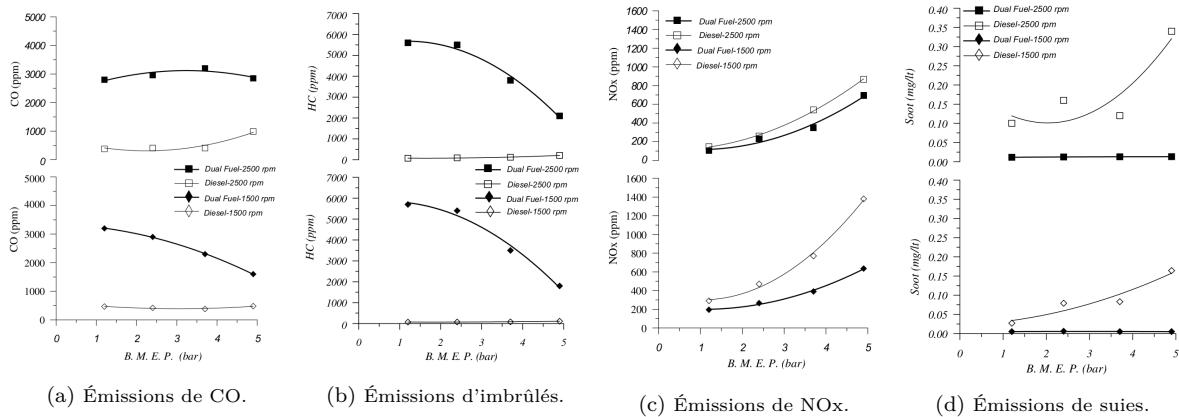
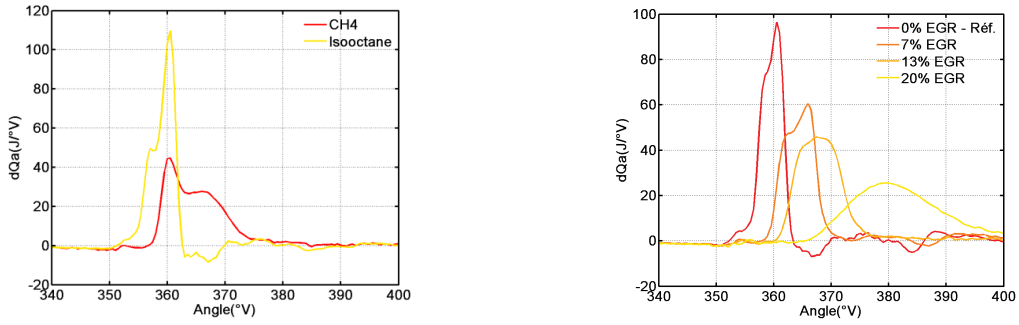


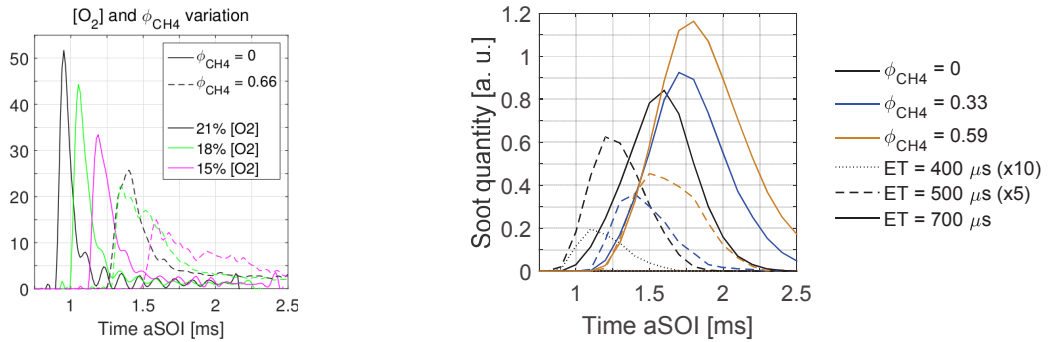
FIGURE 1.9 – Émissions polluantes pour différentes conditions de charge (BMEP = *Break Mean Effective Pressure*) en configuration *Dual-Fuel* méthane/gazole. Comportement caractéristique rencontré en *Dual-Fuel*, par rapport à un fonctionnement Diesel classique : plus faibles émissions de suies et NOx, plus fortes émissions de CO et d'imbrûlés (HC). Repris de Papagiannakis *et al.* [83].

L'influence de la richesse et de la nature du carburant de la charge pré-mélangée, du taux d'EGR, et du ratio massique des deux carburants ont également été étudiées dans les travaux de thèse de Belaid [11], en configurations iso-octane/gazole et méthane/gazole. Il en ressort notamment le caractère inhibiteur du méthane sur l'AI Fig.1.10a. Également, la propagation d'une flamme pré-mélangée initiée par AI peut ne pas être soutenue pour des charges principales trop pauvres. L'inflammabilité de la charge principale a donc une importance critique sur le dégagement de chaleur et les émissions d'hydrocarbures imbrûlés. De faibles masses de carburant pilote peuvent également être insuffisantes pour assurer la combustion de l'ensemble de la charge principale, indépendamment de sa richesse, ce qui peut favoriser la production d'imbrûlés. Le taux d'EGR imité ici via une dilution au diazote, induit une augmentation des délais d'AI, et une diminution du dégagement de chaleur attribué à la propagation de flamme subséquente à l'AI en raison d'une diminution de sa vitesse de propagation Fig.1.10b.



(a) Dégagement de chaleur (en Joule par degré vilebrequin) pour des configurations *Dual-Fuel*, iso-octane/gazole et méthane/gazole. Repris de Belaid [11].

(b) Dégagement de chaleur (en Joule par degré vilebrequin) pour une configuration *Dual-Fuel* iso-octane/gazole pour différents taux de dilution. Repris de Belaid [11].



(c) Dégagement de chaleur pour différents taux de dilution et différentes richesses en méthane. Repris de Srna [115].

(d) Évolution temporelle de la quantité de suies dans la chambre, pour plusieurs richesses en méthane dans la charge principale, et pour différentes durées d'injection (ET = *Energizing Time* - Durée de l'injection). Repris de Srna [115].

FIGURE 1.10 – Influence de la composition du pré-mélange sur le taux de dégagement de chaleur et sur la production de suies. Le méthane possède un caractère inhibiteur de réaction participant à retarder l'AI par rapport à l'iso-octane Fig.1.10a et 1.10c. L'augmentation du taux de dilution génère les mêmes effets de retards à l'AI Fig.1.10b et 1.10c. L'augmentation de la durée d'injection et de la richesse en méthane de la charge principale augmente la production de suies Fig.1.10d

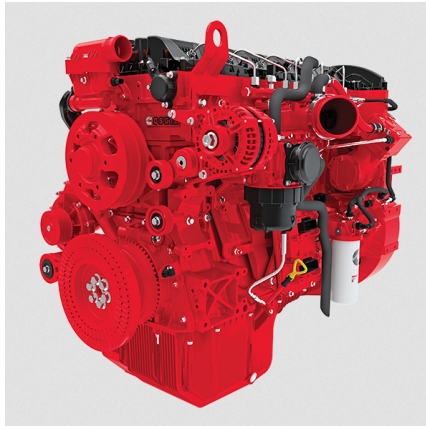
L'influence de la richesse du pré-mélange, et du taux d'EGR, a également été étudiée dans les travaux de thèse de Srna [115]. L'augmentation de la richesse en méthane et du taux de dilution de la charge principale induit une augmentation des délais d'AI, une augmentation du dégagement de chaleur durant la phase de propagation de flamme Fig.1.10c, mais aussi une augmentation de la quantité de suies produites. La formation de suies est principalement attribuée à la combustion se déroulant au voisinage du spray, et non à la combustion de la charge principale air/méthane. L'augmentation de la richesse en méthane réduit alors la disponibilité de l'oxygène nécessaire l'oxydation du carburant pilote et favorise la formation de suies. En outre, la durée d'injection du spray apparaît comme un facteur influençant la formation de suies. Une injection courte entraîne une dispersion plus rapide du spray pilote, un mélange plus homogène, et des délais d'AI plus longs. Cela participe à réduire la richesse locale dans le sillage du spray et défavorise la production de suies Fig.1.10d.

1.6.3 Applications *Dual-Fuel* industrielles

Le moteur Dual-Fuel est aujourd'hui essentiellement développé pour des applications à haute cylindrée unitaire rencontrées dans les véhicules terrestres de type poids lourd, et les véhicules maritimes. Des applications pour les dispositifs de forage existent également. Outre ses faibles émissions polluantes et son rendement thermodynamique élevé, un avantage pratique du moteur Dual-Fuel est sa capacité à revenir à un mode de fonctionnement traditionnel Diesel si les conditions d'utilisation l'exigent. La raison principale pour laquelle le moteur Dual-Fuel est rencontré dans les applications lourdes (navires, poids lourds) est le dispositif de stockage de carburant.

En effet, le moteur Dual-Fuel utilise usuellement un couple gazole/gaz naturel. Le gazole étant stockable sous phase liquide, il possède une densité énergétique (i.e. énergie par unité de volume) importante. À l'inverse, aux conditions

atmosphériques, le gaz naturel se trouve (par définition) sous phase gazeuse et possède une densité énergétique de l'ordre de 1000 fois inférieure. Afin d'augmenter sa densité énergétique, le gaz naturel nécessite d'être comprimé à haute pression, dans une cuve étanche, et résistante aux forts niveaux de pression exercés. Cela se traduit par une augmentation significative de la masse et du volume du réservoir par rapport à un réservoir de carburant liquide. Les aspects de praticité rendent l'utilisation du gaz naturel, et donc par extension du moteur *Dual-Fuel*, peu envisageable pour des véhicules légers car le poids/volume du réservoir représenteraient une fraction trop importante du véhicule lui-même. Cela favorise alors plutôt son utilisation pour des véhicules lourds, ou stationnaires tels que les foreuses, pour lesquels la masse et le volume du réservoir sont moins problématiques. À titre d'illustration, quelques exemples d'applications industrielles sont présentées Fig.1.11.



(a) Moteur *Dual-Fuel* Cummins QSG12. Forage pétrolier [1].



(b) Moteur *Dual-Fuel* Wärtsilä 31DF. Transport maritime [3].



(c) Volvo FM400 CNG équipé d'un moteur *Dual-Fuel*. Transport terrestre [2].

FIGURE 1.11 – Illustration de différentes application industrielles du moteur *Dual-Fuel*.

1.7 Objectifs de la thèse

L'objectif de cette thèse est de proposer une approche de modélisation prédictive et industrialisable des phénomènes de transition AI→déflagration rencontrés en conditions moteur Dual-Fuel. Toutefois, les modèles de combustion actuels sont généralement développés pour représenter un régime de combustion particulier, et non l'interaction entre deux régime distincts (AI/déflagration). De même, la compréhension de la physique associée aux phénomènes de transition AI→déflagration est relativement limitée, ce qui en complique la modélisation. L'objectif principal de ce travail est alors de déterminer, sur la base d'une étude fondamentale de la transition AI→déflagration, un critère de transition physique et générique exploitable en calcul moteur LES, permettant une modélisation adaptée aux différents modes de combustion rencontrés.

1.8 Organisation du manuscrit

Ce manuscrit s'organise autour de trois axes principaux :

Dans un premier temps, un état de l'art regroupant des expérimentations et des études numériques relatives aux phénomènes de transition AI→déflagration en conditions mono/bi-carburant est présenté au chapitre 2. Des éléments d'analyse, en vue d'une étude fondamentale envisagée pour la suite sont notamment identifiés. Un passage en revue de différentes approches de modélisation de l'AI et de la propagation de flamme pré-mélangée turbulente, potentiellement utiles à une modélisation de la transition AI→déflagration est réalisé au chapitre 3. Deux approches de modélisation LES potentiellement industrialisables sont notamment identifiées : TKI-ECFM et TFM. L'approche TKI-ECFM repose sur le modèle de chimie tabulée TKI pour représenter l'AI, et le modèle à transport de densité de surface de flamme ECFM pour le régime de déflagration. Le modèle TFM, initialement développé pour représenter un régime de propagation de flamme, apparaît également plausible pour représenter des phénomènes de transition AI→déflagration. Contrairement à TKI-ECFM, TFM repose sur une résolution directe de la chimie.

Dans un second temps, une étude fondamentale de la transition AI→déflagration en configuration simplifiée 1D mono/bi-carburant est réalisée au chapitre 4, et permet notamment d'identifier des mécanismes intrinsèques au phénomène, ainsi que des critères de transition potentiellement utilisables dans le cadre d'une modélisation LES. En conséquence, le chapitre 5 est dédié à la modélisation de la transition AI→déflagration sur la base des modèles TKI-ECFM et TFM, et à leur évaluation sur des configurations 1D analogues à celles utilisées pour l'étude fondamentale du chapitre 4. Un travail de modélisation important est effectué sur la base du modèle TFM, et constitue un élément central de ce travail.

Dans un troisième temps, les approches de modélisation développées et évaluées au chapitre 5 en configuration 1D, sont testées au chapitre 6 sur une configuration 3D LES Dual-Fuel. Cette configuration est représentative d'un banc expérimental présent à l'ETH Zurich, et permet une comparaison expérience/simulation visant à démontrer la validité et les limites des approches de modélisation développées à partir de TKI-ECFM et TFM. Le chapitre 7 constitue une étude de faisabilité et d'applicabilité : le travail de développement complexe effectué sur la base du modèle TFM est testé sur une configuration LES 3D représentative d'un cas moteur Dual-Fuel industriel.

Transition AI→déflagration

Le moteur Dual-Fuel présente la caractéristique de faire intervenir de façon simultanée des phénomènes d'AI, et de déflagration. La transition AI→déflagration est un phénomène complexe, et la nécessité de développer des technologies moteur innovantes mettant en jeu ce type de phénomène en force donc la compréhension. Les régimes d'AI et de déflagration sont pilotés par des mécanismes très différents, et des éléments d'identification sont nécessaires à une modélisation prédictive dans un contexte d'application moteur LES. Ainsi, une littérature assez riche existe autour de la transition AI→déflagration dans un contexte de combustion mono-carburant et bi-carburant, à travers des études expérimentales et numériques. Ce chapitre est donc dédié à l'état de l'art des approches existantes concernant la compréhension de la transition AI→déflagration, et des éléments permettant l'identification des régimes de combustion.

2.1 Outils théoriques pour la transition AI→déflagration

Un travail pionnier concernant la transition AI→déflagration est effectué en 1980 par Zeldovich [136] dans un contexte d'allumage par AI en milieu stratifié en réactivité (stratification en température). Une classification des régimes de combustion basée sur la vitesse théorique d'un front d'AI est ainsi proposée, et généralement désignée par "théorie de Zeldovich". Cette dernière suppose que la propagation d'un front d'AI est uniquement pilotée par la réactivité locale du mélange, et considère les phénomènes réactifs dominants devant les phénomènes diffusifs, lesquels considérés négligeables. Ainsi, partant de l'idée d'une iso-surface de délais d'AI $\tau_{AI}(x, y, z) = cst$, la propagation de cette iso-surface s'effectue alors, d'après la théorie de Zeldovich [136], selon la direction normale à celle-ci, et à une vitesse S_{AI} inversement proportionnelle au gradient de délais d'AI Eq.(2.1).

La vitesse d'un front d'AI selon la théorie de Zeldovich s'exprime comme :

$$S_{AI}(x, y, z) = \frac{1}{|\nabla\tau_{AI}(x, y, z)|} \quad (2.1)$$

Plusieurs régimes de combustion théoriques sont alors proposés sur la base de la vitesse théorique S_{AI} :

- Régime de détonation faible : $S_{AI} > u_J$, avec u_J correspondant à la vitesse de détonation de Chapman-Jouguet permettant un couplage entre une onde de pression et un front de réaction (front d'AI), non-détaillée ici. En régime de détonation faible, le front de réaction se déplace à une vitesse supersonique et est suivi

par une onde de pression se déplaçant à une vitesse inférieure à celui-ci.

- Régime de détonation : $S_{AI} \lesssim u_J$. Le front de réaction (front d'AI) se déplace à la même vitesse que l'onde de pression qui l'accompagne. L'onde de pression entraîne une compression-détente des gaz qu'elle traverse, et en provoque l'auto-inflammation. La combustion fournit en retour l'énergie nécessaire au maintien d'une onde de pression de forte amplitude. L'onde de pression et la combustion s'entretiennent alors mutuellement, et propagent à une vitesse transsonique.
- Régime de propagation d'AI : $u_J > a \gg S_{AI} > u_f$. Le front de réaction (front d'AI) se déplace à une vitesse largement subsonique, toutefois supérieure à une vitesse de flamme pré-mélangée u_f . Aucune interaction significative entre une onde de pression et un front d'AI n'intervient dans ces conditions.
- Régime de déflagration : $S_{AI} < u_f$. Les gradients de délais d'auto-inflammation sont trop forts pour générer une vitesse de propagation supérieure à la vitesse de flamme pré-mélangée u_f . En outre, de telles conditions impliquent que les phénomènes diffusifs ne peuvent plus être considérés négligeables devant les phénomènes réactifs. Ces derniers jouent alors un rôle prédominant dans la propagation du front de réaction. Il s'agit alors d'une propagation de flamme pré-mélangée, et non d'une propagation de front d'AI.

Plus récemment, la théorie de Zeldovich [136] est adaptée par Sankaran et al. [101] à l'analyse des régimes de combustion en configuration DNS 2D, avec un mélange air/hydrogène homogène en composition et hétérogène en température, relatif à un contexte moteur HCCI. Un critère β basé sur la comparaison entre la vitesse de déplacement du front de réaction S_d ¹, et la vitesse d'un front d'AI calculée selon la théorie de Zeldovich [136] (ici notée S_{sp}) est proposé pour discriminer les deux modes de combustion Eq.(2.2). Si $\beta < 1.0$, le régime dominant est la propagation d'AI, si $\beta > 1.0$, il s'agit d'un régime de déflagration. Le paramètre $C_\beta = 0.5$ est un paramètre introduit de façon à prendre en compte le temps d'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée à partir d'un noyau d'AI, même si la vitesse de déplacement du front est proche de celle d'une flamme pré-mélangée. En d'autres termes, même si $S_d \approx S_L$, l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée n'est pas instantané, et un l'introduction d'un paramètre C_β inférieur à 1.0 vise à prendre en compte ce temps d'établissement.

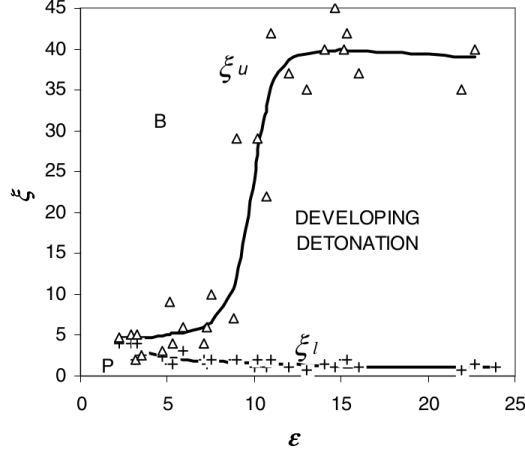
$$\beta = C_\beta \frac{S_d}{S_{sp}} \quad (2.2)$$

La théorie de Zeldovich est également reprise par Bradley et al. [17] pour l'étude de l'allumage par AI dans un contexte de moteur CAI (Controlled Auto-Ignition). Un nombre important de simulations 1D a permis d'établir une cartographie en coordonnées $\xi - \epsilon$ (dit "diagramme de Bradley") des régimes de combustion subséquents l'apparition d'un noyau d'AI. La configuration numérique consiste en un domaine homogène en composition comportant une stratification en température à une extrémité permettant d'imiter la présence d'un noyau d'AI dans une chambre de combustion. Les équations Eq.(2.3) et Eq.(2.4) comportent un ensemble de termes relatifs à la réactivité du noyau, et à son étendue spatiale : (i) τ_e représente le temps d'emballage thermique, à savoir le temps nécessaire pour atteindre 5% du dégagement de chaleur maximal, (ii) τ_{AI} représente les délais d'AI locaux dans le noyau, (iii) r_0 représente l'étendue du gradient thermique, et est assimilé à la taille du noyau d'AI, (iv) a représente la vitesse du son aux conditions thermodynamiques locales, tandis que r représente une coordonnée spatiale, et T la température locale.

$$\xi = \frac{a}{S_{AI}} = a \left(\frac{\partial T}{\partial r} \frac{\partial \tau_{AI}}{\partial T} \right) \quad (2.3)$$

$$\epsilon = \frac{r_0}{a\tau_e} \quad (2.4)$$

1. La vitesse de déplacement S_d représente la vitesse du front de réaction dans le référentiel de l'écoulement, et est décrite plus en détail en section 4.1.6.4.


 FIGURE 2.1 – Diagramme de régime de combustion en coordonnées $\xi - \epsilon$ proposé par Bradley *et al.* [17].

Le diagramme de Bradley comporte trois régions : (i) la région Developing Detonation pour laquelle la vitesse de propagation du front d'AI est transsonique et donc comparable à la vitesse de détonation de Chapman-Jouguet, (ii) la région B pour laquelle la propagation du front est subsonique, (iii) la région P impliquant une propagation supersonique. Une application du diagramme de Bradley à un cas moteur est proposée par Robert *et al.* [98] dans le cadre d'une étude LES du cliquetis. L'augmentation de l'avance à l'allumage accroît la probabilité de présence de poches de gaz dans la péninsule de détonation (Developing Detonation), traduisant une amplification du cliquetis. Bates *et al.* [9, 10] approfondissent l'analyse de Bradley [17] en proposant une prise en compte de la turbulence pour déterminer le régime de combustion dominant, dans un contexte d'application moteur.

Les travaux de Grogan *et al.* [39] introduisent les nombres de Reynolds Eq.(2.5) et Damköhler Eq.(2.6), afin de quantifier l'influence de la turbulence sur le régime de combustion dominant, dans le cadre d'un allumage par AI. Sur la base d'une comparaison entre : (i) la vitesse théorique du front d'AI ($\frac{\partial T}{\partial \xi} \frac{\tau_{ign}}{\partial T}$), (ii) la vitesse de flamme laminaire S_L , (iii) la vitesse du son a , les auteurs ont pu établir un diagramme de combustion a priori en coordonnées $Re_t - Da_t$ quantifiant la dominance AI/déflagration Fig.2.2.

$$Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \quad (2.5) \quad Da_t = \frac{\tau_t}{\tau_{AI}} \quad (2.6)$$

avec u' , l_t , ν , τ_t , τ_{AI} respectivement les fluctuations de vitesse turbulente, l'échelle intégrale turbulente, la viscosité cinématique, le temps intégral turbulent, et les délais d'AI du mélange. Les fluctuations thermiques sont représentées par le gradient de température $\partial T / \partial \xi$, et la sensibilité des délais d'AI aux fluctuations de température est exprimée par $\partial \tau_{AI} / \partial T$. Ici, la variable ξ fait référence à une coordonnée spatiale, à ne pas confondre avec la variable ξ utilisée dans le diagramme de Bradley Fig.2.1. Les régimes de combustion identifiés sont les suivants :

- Quiescent : Régime d'allumage homogène correspondant à une AI uniforme dans la chambre qui se comporte alors comme un réacteur homogène. Le temps caractéristique de diffusion des gradients τ_ν est faible devant le temps caractéristique de la turbulence τ_t , ce qui permet une homogénéisation du mélange avant l'AI.
- Strong : Régime d'allumage caractérisé par l'apparition de phénomènes de détonation. Dans cette configuration ainsi que les suivantes, le temps caractéristiques τ_ν des phénomènes diffusifs est trop long pour homogénéiser le mélange avant l'AI. De faibles hétérogénéités subsistent lors de l'AI et le front de réaction se déplace à une vitesse transsonique.
- Mild : Régime d'allumage stratifié menant à l'apparition de phénomènes de déflagration subséquents à l'AI. Comparativement aux configurations précédentes, les hétérogénéités de température sont fortes et ne

permettent pas la propagation prolongée d'un front d'AI subséquent à l'allumage.

- DDT (Deflagration to Detonation Transition) : Régime mixte dans lequel peuvent coexister des régimes de déflagration et de propagation d'onde de détonation.

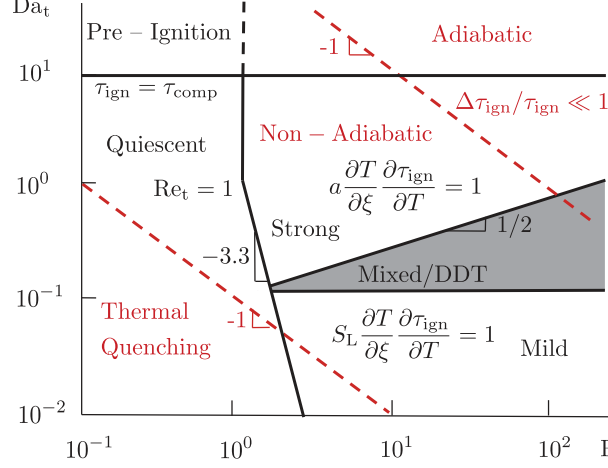


FIGURE 2.2 – Diagramme de régime de combustion en coordonnées $Re_t - Da_t$ proposé par Grogan *et al.* [39].

Le diagramme a priori proposé par Grogan *et al.* [39], voir Fig.2.2, est comparé à des analyses expérimentales, et se révèle en accord avec les régimes observés. Il peut donc servir de guide permettant de déterminer les régimes de combustion probables dans différentes conditions typiques-moteur.

L'influence de la turbulence sur le régime de déflagration dominant est étudiée par Im *et al.* [46] à partir d'une analyse dimensionnelle, basée sur le critère de Sankaran *et al.* [101]. Il en découle un diagramme de combustion en coordonnées $Re_l - Da_l$, avec l l'échelle intégrale, u' la vitesse turbulente, τ_l le temps intégral, τ_{ig} le délai d'AI, ν la viscosité Fig.2.3.

$$Re_l = \frac{u'l}{\nu} \quad (2.7) \quad Da_l = \frac{\tau_l}{\tau_{ig}} \quad (2.8)$$

à partir de lois d'échelles (non-décrites ici), le nombre de Damköhler à l'échelle de Taylor Da_λ et le rapport δ_f/l s'écrivent :

$$Da_\lambda = \frac{\tau_\lambda}{\tau_{AI}} = Da_t Re^{-1/3} \quad (2.9) \quad \frac{\delta_f}{l} = Re^{-1/2} Da_l^{-1/2} \frac{\tau_{ig}}{\tau_f} \quad (2.10)$$

avec δ_f et τ_f respectivement l'épaisseur de flamme et le temps de flamme caractéristique.

Par un jeu d'hypothèse simplificatrices (non décrites ici), le critère de Sankaran *et al.* [101] est ré-écrit Eq.(2.11) :

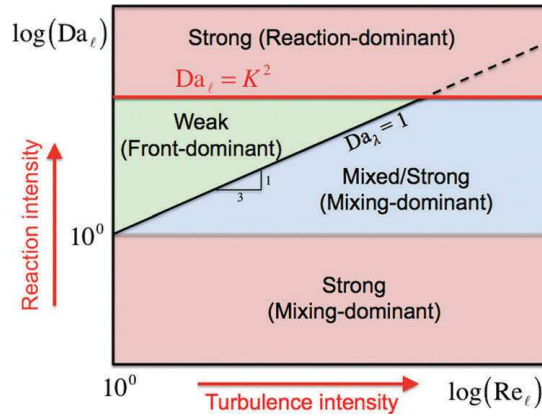
$$Sa = 0.5 \frac{S_L}{S_{AI}} = 0.5 S_L \left| \frac{d\tau_{ig}}{dT} \nabla T \right| \underset{\text{hypothèses}}{\approx} 0.5 S_L \left| \frac{d\tau_{ig}}{dT} \right| |\widetilde{\nabla T}| \quad (2.11)$$

à noter que $|\widetilde{\nabla T}|$ représente une estimation du taux de dissipation turbulent des fluctuations de température, et non un gradient de température filtré au sens de la LES. Les lois d'échelles permettent en outre d'écrire Eq.(2.12) :

$$|\widetilde{\nabla T}| \approx \frac{T'}{l Re_l^{-1/2}} \quad (2.12)$$

avec T' une amplitude de fluctuation de température. Finalement, le critère de Sankaran *et al.* [101] est ré-écrit sous la forme suivante :

$$Sa = K Da_l^{-1/2} \text{ avec } K = 0.5 \left(\frac{T'}{\tau_f \tau_{ig}^{1/2}} \right) \left| \frac{d\tau_{ig}}{dT} \right| \quad (2.13)$$


 FIGURE 2.3 – Diagramme de régime de combustion en coordonnées $Re_l - Da_l$ proposé par Im *et al.* [46].

Les régimes identifiés dans le diagramme Fig.2.3 sont :

- Strong (Reaction-dominant) : Les hétérogénéités de mélange sont fortes, mais la réactivité élevée du mélange permet tout de même la propagation d'un front d'AI (vitesse élevée). Cela correspond à un mélange fortement stratifié fortement réactif, i.e. le terme $|\widetilde{\nabla T}|$ est élevé mais est surcompensé par des valeurs $|\frac{d\tau_{ig}}{dT}|$ très faibles.
- Strong (Mixing-dominant) : La réactivité du mélange est faible, mais les hétérogénéités de mélange sont globalement dissipées par le brassage turbulent, ce qui permet la propagation d'un front d'AI (vitesse élevée). Cela correspond à un mélange faiblement stratifié et faiblement réactif. Le terme $|\widetilde{\nabla T}|$ est faible mais est surcompensé par des valeurs $|\frac{d\tau_{ig}}{dT}|$ très élevées.
- Weak (Front-dominant) : Les hétérogénéités de mélange sont fortes (terme $|\widetilde{\nabla T}|$ élevé) et la réactivité du mélange est faible (terme $|\frac{d\tau_{ig}}{dT}|$ élevé), ce qui entraîne des vitesses de propagation faibles. Cela favorise l'apparition d'un régime de déflagration piloté par une interaction diffusion/réaction.
- Mixed/Strong (Mixing-dominant) : Région intermédiaire dans laquelle des phénomènes de déflagration, de propagation de front d'AI sont rencontrables.

Le diagramme proposé par Im *et al.* Fig.2.3 est comparé aux expériences conduites par Mansfield *et al.* [67] en machine à compression rapide sur un mélange turbulent air/gaz de synthèse. Ainsi, par une analyse qualitative d'imagerie laser, trois régimes de combustion sont identifiés : "Strong", "Weak" et "Weak transitioning to strong". Les cas affichant des zones d'allumage larges et uniformes sont classifiées "Strong". Les cas affichant des zones d'allumage plus minces et des propagations de flammes sont classifiées "Weak". Les cas affichant un allumage localisé accompagné de propagations de flammes ("Weak") suivi d'un allumage plus large et uniforme ("Strong") sont classifiées "Weak transitioning to strong". Les calculs des nombres Re_l et Da_l associés à ces cas révèlent que les régimes observés expérimentalement correspondent à ceux prédits par le diagramme Fig.2.3.

En outre, Pal *et al.* [82] conduisent une étude DNS 2D des régimes de propagation initiés par un noyau d'AI dans un mélange turbulent air/gaz de synthèse, homogène en composition et stratifié en température. Les régimes de combustion identifiés en DNS, notamment via l'analyse des vitesses de déplacement S_d , correspondent à ceux prédits par le diagramme $Re_l - Da_l$ Fig.2.3. L'accord entre ce diagramme et un ensemble de données expérimentales [67] et numériques [82] appuie donc sa validité.

Un outil de diagnostic est également proposé par Karimkashi *et al.* [52]. Ce dernier s'appuie sur le critère β proposé par Sankaran *et al.* [101], et fournit une cartographie des régimes de combustion en coordonnées $Y'(0)/[Y'(0)]_{max} - \lambda/\lambda_{diff}$ Fig.2.4. La grandeur $Y'(0)$ représente une amplitude de fluctuation de réactivité à un instant quelconque, $[Y'(0)]_{max}$ représente une amplitude de fluctuation de réactivité à un état initial (i.e.

avant dissipation), λ une échelle de stratification quelconque, λ_{diff} une échelle de stratification dont le temps caractéristique de dissipation est comparable aux délais d'AI τ du mélange. Les auteurs aboutissent à un diagramme bimodal AI/déflagration Fig.2.4. Une étude des régimes de combustion en configuration DNS 2D Dual-Fuel air/diméthyléther/méthane est également conduite, et les auteurs identifient des régimes identiques à ceux prédits par le diagramme Fig.2.4 à conditions équivalentes. Cela suggère donc la validité de l'approche de diagnostic développée.

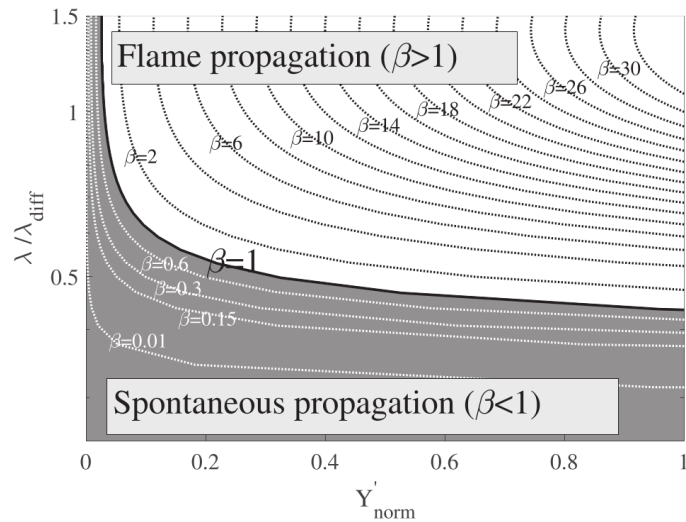


FIGURE 2.4 – Diagramme de régime de combustion en coordonnées $Y'(0)/[Y'(0)]_{max} - \lambda/\lambda_{diff}$ proposé par Karimkashi *et al.* [52].

2.2 Travaux expérimentaux

La propagation d'un front de réaction initié par AI est également étudiée par Strozzi et al. [116] en machine à compression rapide, avec un mélange air/méthane homogène en composition et stratifiée en température. Des champs de température expérimentaux permettent de calculer la vitesse théorique d'un front d'AI exprimée par la théorie de Zeldovich (ici notée S_{sp}). Sur la base du critère β proposé par Sankaran et al. [101] Eq.(2.14), une analyse est proposée. Ainsi, les valeurs de β supérieures à 2 sont alors assimilées à une propagation de flamme de pré-mélange tandis que des valeurs inférieures à 2 sont assimilées à une propagation d'AI Fig.2.5.

$$\beta = 0.5 \frac{S_L}{S_{sp}} \quad (2.14)$$

Les auteurs rapportent que la distribution du champ de température dans les gaz frais influence fortement le dégagement de chaleur de même que la vitesse de propagation du front de réaction. Ainsi, les cas mettant en jeu des valeurs β plus faibles (mélange homogène) s'accompagnent d'un dégagement de chaleur élevé, et les cas aux valeurs β supérieures (mélange stratifié) s'accompagnent d'un dégagement de chaleur faible.

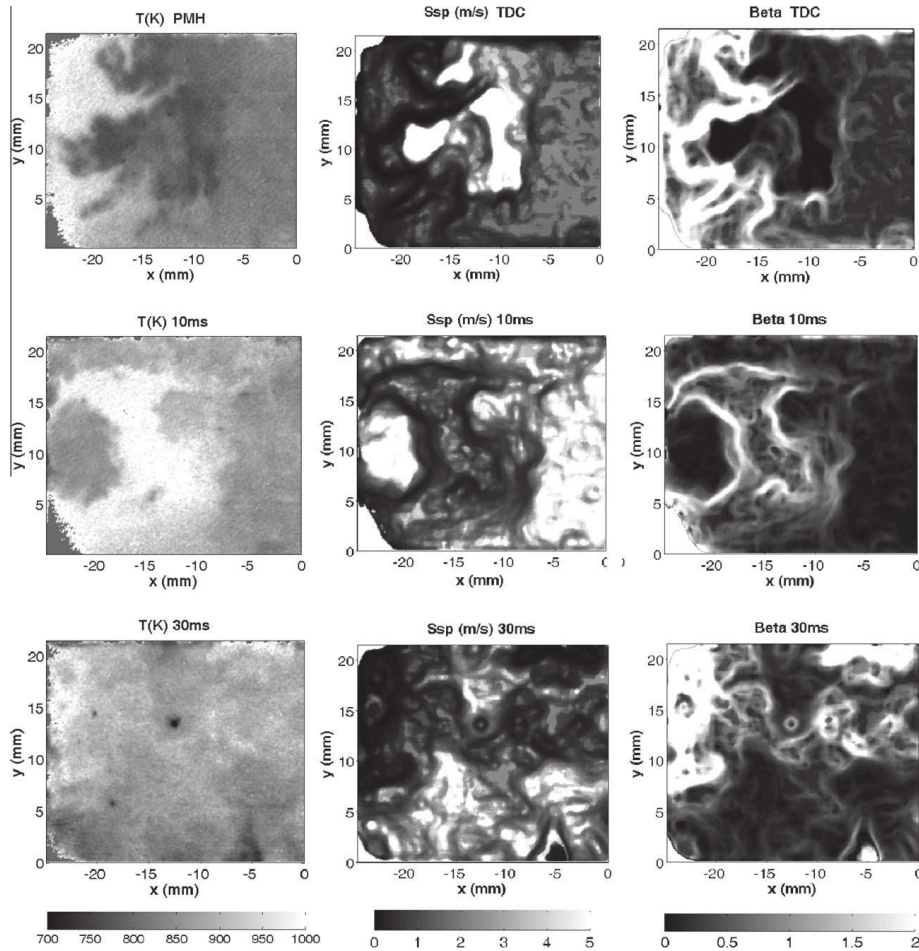


FIGURE 2.5 – Température (gauche), Vitesse de propagation estimée à partir de la théorie de Zeldovich [136] et notée S_{sp} (milieu), Critère β (droite). Trois instants sont sélectionnés : PMH, PMH+10ms, et PMH+30ms (de haut en bas). Repris de Strozzi *et al.* [116].

En pratique, des gradients thermiques faibles (β élevé), favorisent un nombre de noyaux d'AI réduit, mais des propagations de front de réaction rapides et un dégagement de chaleur élevé. Cela est associé à la dominance d'un régime de propagation d'AI. À l'inverse, des gradients thermiques plus forts (β faible) génèrent un nombre de noyaux d'AI élevé, mais des propagations de front de réaction lentes et dégagement de chaleur faible. Cela est associé à la dominance d'un régime de déflagration. Le critère β Eq.(2.14) basé sur la comparaison des vitesses

d'AI et de flamme laminaire apparaît ici pertinent pour déterminer le régime de combustion associé à l'allumage par AI d'un mélange stratifié en réactivité (température).

Une étude de l'allumage par AI en milieu stratifiée en température, en machine à compression rapide, est également proposée par Walton et al. [124]. Plusieurs mélanges air/iso-octane sont étudiés (variations de richesse, taux de dilution, conditions de pression/température). La diffusivité thermique apparaît comme un paramètre clef sur dynamique de combustion, puisque celle-ci influence les gradients de réactivité (ici des gradients thermiques) pilotant la dynamique de l'allumage par AI. En effet, les conditions thermodynamiques impliquant une diffusivité élevée tendent à dissiper les gradients de température avant l'AI, et favorisent un allumage homogène. À l'inverse, les mélanges à plus faible diffusivité thermique atténuent peu les gradients de réactivité et favorisent une AI stratifié et dispersée. Ces constats sur les gradients de réactivité corroborent les tendances rapportées par Strozzi et al. [116]. Une estimation des gradients de température au sein de la chambre permet le calcul de la vitesse propagation d'un front d'AI à partir de la théorie de Zeldovich [136] (ici notée u_{sp}). Ces vitesses théoriques se révèlent comparables à celles mesurées dans la chambre Fig.2.6 (notées U), appuyant la validité de la théorie de Zeldovich dans cette étude.

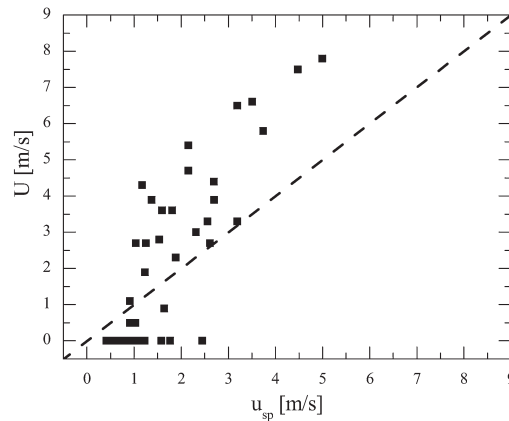


FIGURE 2.6 – Comparaison entre la vitesse de Zeldovich notée u_{sp} et la vitesse de propagation du front d'AI mesurée et notée U . Le rapport U/u_{sp} de l'ordre de 1.0 suggère la prédictivité de la théorie de Zeldovich. Repris de Walton *et al.* [124].

2.3 Travaux numériques

Une étude reprenant de façon assez directe la théorie de Zeldovich [136] est menée par Gu et al. [40] sur une configuration 1D homogène en composition (mélange air/hydrogène) et stratifiée en température. Ainsi, la propagation d'un front de réaction pré-mélangé initié par AI apparaît principalement pilotée par le gradient de réactivité, et cinq régimes de propagation sont identifiés sur la base d'un critère ξ Eq.(2.15).

$$\xi = \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right) \left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_c^{-1} \quad (2.15)$$

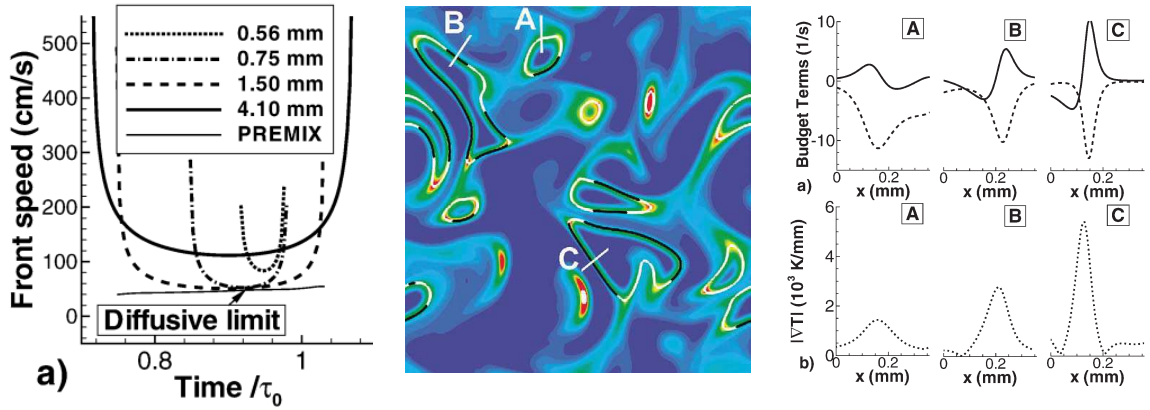
avec r une coordonnée spatiale, et $\left(\frac{\partial T}{\partial r} \right)_c^{-1}$ le gradient de température critique entraînant une vitesse de propagation du front d'AI égale à la vitesse du son $a = \sqrt{\gamma r_g T}$. Les modes de propagation identifiés dans l'étude sont les suivants :

- $\xi = 0$: Explosion thermique. L'ensemble de la charge présente dans le domaine brûle simultanément (i.e. AI en masse).
- $0 < \xi < \xi_i$: Propagation supersonique du front d'AI. Le front de réaction (front d'AI) propage à une vitesse supérieure à l'onde de pression qu'il génère.

- $\xi_l \leq \xi < \xi_u$: Régime de détonation. Le front de réaction (front d'AI) est initié par une onde de pression elle-même entretenue par l'énergie dégagée par la combustion. Il y a alors de couplage entre onde de réaction et onde de pression.
- $\xi_u \leq \xi < au_l^{-1}$: Propagation subsonique d'un front d'AI. Le front de réaction (front d'AI) propage à une vitesse inférieure à la vitesse du son et n'entraîne aucun couplage pression/réaction.
- $\xi \geq au_l^{-1}$: Régime de déflagration. La propagation du front de réaction (front de flamme) est guidée par une interaction diffusion/réaction.

avec ξ_l , ξ_u correspondant aux valeurs limites supérieures et inférieures de ξ permettant un couplage pression/réaction, et u_l correspond à la vitesse de flamme laminaire.

Les travaux de Chen et al. [23], et Hawkes et al. [42], font partie des travaux pionniers sur la transition AI→déflagration en configuration DNS. Ces derniers concernent la combustion à volume constant d'un mélange homogène pauvre air/hydrogène, dans un contexte de moteur HCCI. Une étude préliminaire 1D est conduite pour évaluer l'impact du gradient de température sur le comportement du front de réaction en conditions laminares. Des phénomènes de transition AI→déflagration sont identifiés par la comparaison entre la vitesse de déplacement du front de réaction S_d , et la vitesse de flamme laminaire S_L , pour des étendues de stratification thermique de 0.65mm, 0.75mm, 1.50mm et 4.10mm Fig.2.7a. Les fortes valeurs de S_d sont associées à une propagation d'AI, les plus faibles à un régime de déflagration.



(a) Évolution temporelle de la vitesse de déplacement du front de réaction S_d , et comparaison avec S_L à iso-conditions (*Diffusive limit*). Cas 1D.

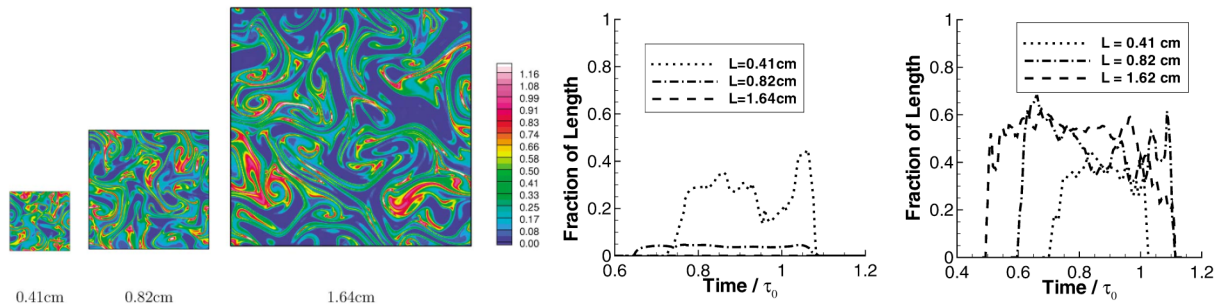
(b) Champs DNS 2D instantané de dégagement de chaleur comportant les zones caractéristiques A, B, C.

(c) Haut : Bilan diffusion/réaction. La ligne continue représente le terme diffusif, la ligne discontinue le terme réactif. Bas : Gradients de température.

FIGURE 2.7 – Analyse du régime de combustion (AI/déflagration) basée sur la vitesse de déplacement S_d Fig.2.7a et sur le bilan diffusion/réaction Fig.2.7c. Les plus forts gradients de température sont associés à un régime de déflagration Fig.2.7c. Repris de Chen *et al.* [23].

S'en suit une étude DNS 2D dans des conditions turbulentes présentant des hétérogénéités de température, et impliquant un allumage par AI, tout comme les calculs 1D. Plusieurs régimes de combustion, associés aux plans de coupe A, B, et C sont identifiés Fig.2.7b. La coupe A exhibe une dominance du terme réactif sur le terme diffusif, et une vitesse de l'ordre de $2.2S_L$ est rapportée. La coupe A est alors associée à un régime de propagation d'AI. Les coupes B et C affichent un relatif équilibre diffusion/réaction et des vitesses proches de S_L . Les coupes B et C sont alors associées à un régime de déflagration Fig.2.7c. Similairement aux tendances notamment rapportées par Sankaran et al. [101], et Strozzi et al. [116], les plus forts gradients de température sont rencontrés dans les régions pilotées par un régime de déflagration, et les plus faibles gradients (i.e. combustion plus homogène) sont rencontrés dans les régions dominées par l'AI.

Une étude paramétrique dans la continuité des travaux de Chen et al. [23] est conduite par Hawkes et al. [42], et met en évidence l'impact de la turbulence sur le régime de combustion subséquent à l'allumage par AI. Dans un premier temps, la taille du domaine de calcul DNS est variée entre $L = 0.41\text{cm}$, $L = 0.82\text{cm}$, $L = 1.62\text{cm}$ Fig.2.8a. Le champ de fluctuation de température imposé en condition initiale est varié proportionnellement à la taille du domaine. En d'autres termes, pour un domaine deux fois plus large, l'amplitude des fluctuations de température est conservée (même T') mais l'échelle spatiale de ces fluctuations est deux fois supérieure ($|\nabla T'$ deux fois inférieur). Ces calculs présentent un champ de vitesse initiale nulle, et sont considérés non-turbulents. Dans un second temps, la même étude est menée à la différence qu'un champ de fluctuations de vitesse turbulente (Passot-Pouquet) est ajouté en condition initiale. Les calculs sont donc considérés turbulents. L'échelle intégrale turbulente varie avec la taille du domaine, tandis que le temps intégral est conservé. L'amplitude des fluctuations de vitesse u' est donc multipliée par le même facteur que l'échelle intégrale. Dans les conditions de l'étude, l'introduction d'un champ turbulent en condition initiale accroît la proportion du domaine pilotée par un régime de déflagration (régions respectant $S_d < 1.1S_L$) par rapport aux cas non-turbulents Fig.2.8b et 2.8c. Pour l'ensemble des cas, cela est attribué à la cascade d'énergie des grandes vers les petites échelles tourbillonnaires. Celle-ci tend à accroître les gradients de température, et favorise le développement d'un régime de déflagration au détriment d'un régime de propagation d'AI.



(a) Champs instantanés de dégagement de chaleur pour différentes tailles de domaine (*i.e.* différentes échelles de fluctuation de vitesse et de température).

(b) Proportion de surface de front associée à un régime de déflagration ($S_d < 1.1S_L$) pour les cas non-turbulents.

(c) Proportion de surface de front associée à un régime de déflagration ($S_d < 1.1S_L$) pour les cas turbulents.

FIGURE 2.8 – Analyse de différents modes de combustion sur la base d'une comparaison entre S_d et S_L , pour des échelles turbulentes variant proportionnellement à la taille du domaine. L'accroissement de la taille du domaine et de l'étendue des fluctuations favorise l'AI, essentiellement pour les cas non-turbulents Fig.2.8b. La turbulence accroît des gradients de température (cascade tourbillonnaire) et favorise le régime de déflagration Fig.2.8c. Repris de Hawkes *et al.* [42].

La méthodologie d'analyse des modes de combustion basée sur le bilan diffusion/réaction et la vitesse de déplacement S_d utilisée par Chen et al. [23] et Hawkes et al. [42] est relativement pionnière dans l'identification des régimes d'AI et de déflagration. Elle est ainsi fréquemment utilisée dans le cadre d'analyses DNS, comme discuté dans la suite.

L'AI est un phénomène essentiellement piloté par la cinétique réactionnelle locale, tandis qu'un front de flamme pré-mélangée est piloté par un relatif équilibre diffusion/réaction. En pratique le bilan diffusion/réaction est souvent utilisé sous la forme d'un nombre de Damköhler défini comme Eq.(2.16). Cette définition est à ne pas confondre avec celle utilisée dans les diagrammes de combustion Fig.2.2 et 2.3.

$$Da = \frac{\dot{\omega}_k}{|\nabla \cdot (\rho \mathcal{D}_k \nabla Y_k)|} \quad (2.16)$$

Ainsi, des valeurs de Damköhler largement supérieures à 1.0 sont associées à un régime de propagation d'AI, et des valeurs de l'ordre de 1.0 sont associées à un régime de déflagration. Toutefois, dans un front de flamme pré-mélangée, l'équilibre entre les phénomènes diffusifs et réactifs peut être très relatif, et définir un critère AI/déflagration sur le nombre Damköhler peut être délicat, plus particulièrement en conditions stratifiées en température, composition, ou à pression variable. Par ailleurs, la définition d'une valeur seuil nécessite souvent des calculs de flamme 1D canoniques dans des conditions représentatives de celles du calcul DNS, et des valeurs comprises entre 0.4 et 4.5 sont notamment rapportées [6, 12, 62, 63, 134]. La variabilité des valeurs utilisées suggère

une certaine dépendance de l'analyse à la valeur de Damköhler seuil choisie.

La vitesse de déplacement S_d (détails en section 4.1.6.4) présente l'avantage d'être relativement simple à analyser car le choix d'une valeur seuil délimitant les régimes de combustion est plus naturelle. En pratique, des valeurs de S_d proches de la vitesse de flamme laminaire S_L sont associées à un régime de déflagration, tandis que des valeurs sensiblement supérieures à S_L sont associées à un régime de propagation d'AI. L'analyse du bilan diffusion/réaction peut ainsi être renforcée d'une comparaison S_d vs S_L .

Dans un contexte moteur HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition), une analyse du bilan diffusion/réaction et de la vitesse de déplacement S_d est conduite par Yoo et al. [129] en configuration DNS 2D, afin d'identifier le régime de combustion d'un mélange homogène air/n-heptane stratifié en température. L'influence du niveau de turbulence u' et de l'amplitude des fluctuations de température T' sont investiguées. L'étude révèle que de fortes fluctuations de température T' favorisent un allumage stratifié et un régime de déflagration. Inversement les faibles fluctuations T' impliquent des gradients de réactivité plus faibles et favorisent un allumage plus homogène entraînant une propagation d'AI Fig.2.10d. En outre, les variations de température moyenne initiale T_0 (indépendamment des fluctuations) révèlent que l'amplitude de T' a peu d'impact sur le mode de combustion dès lors que le temps caractéristique turbulent est faible devant les délais d'AI ($\tau_t \ll \tau_{AI}$). En pratique, le mélange est homogénéisé par le brassage tourbillonnaire avant l'AI, indépendamment de l'amplitude initiale de T' . À l'inverse, l'influence des fluctuations initiales T' est significative pour des temps turbulents plus longs entraînant des phénomènes de dissipation moins rapides.

Dans un contexte HCCI/SACI (Homogeneous Charge/Spark Assisted Compression Ignition), Yoo et al. [130] étudient l'influence des fluctuations de température T' , de vitesse u' et de l'échelle intégrale l_e sur le régime de combustion, en configuration DNS 2D air/iso-octane. Deux configurations moteur sont étudiées : HCCI et SACI. Les conditions initiales sont identiques entre ces deux configurations, à la différence qu'un point chaud est superposé au champ de température initiale pour SACI, afin de modéliser le dépôt d'énergie dû à une bougie. Le délai de dépôt d'énergie τ_s est également étudié (SACI uniquement), ce façon à évaluer la réponse du mélange à différent(e)s avances/retards à l'allumage en situation moteur. Similairement aux conclusions de Yoo et al. [129], l'analyse du bilan diffusion/réaction et de la vitesse de déplacement révèle que le régime de déflagration est favorisé par de fortes fluctuations de température T' Fig.2.10c. En outre, l'augmentation de l'intensité turbulente u' entraîne une homogénéisation rapide du mélange favorisant une propagation d'AI. Toutefois, l'influence de u' est relativement limitée lorsque l'échelle turbulente l_e est grande devant l'échelle des fluctuations thermiques l_{T_e} . En effet, lorsque $l_e \gg l_{T_e}$, le brassage tourbillonnaire induit une faible dissipation des gradients de température (i.e. peu d'homogénéisation du mélange), et ne favorise pas significativement un régime de propagation d'AI. Pour la configuration SACI, un allumage plus précoce favorise la combustion du mélange par un régime de déflagration avant que les délais d'AI n'aient été atteints. Ainsi, des valeurs τ_s faibles favorisent un régime de déflagration, des valeurs élevées favorisent un régime de propagation d'AI.

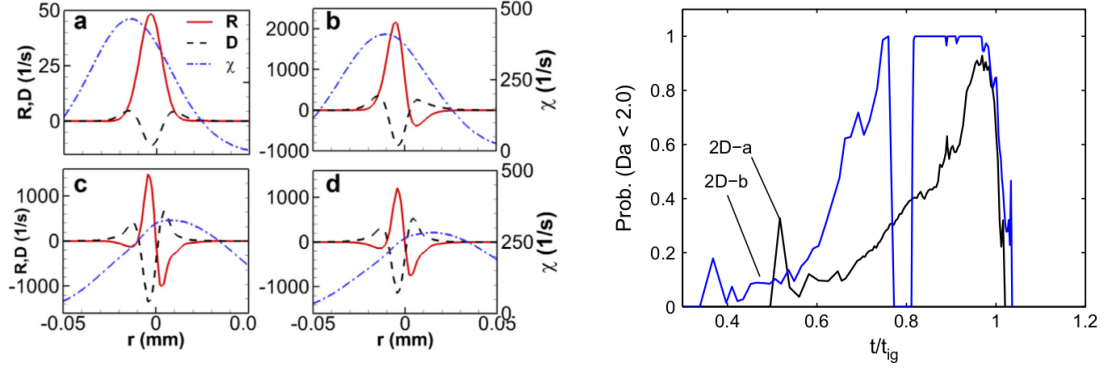
Dans un contexte HCCI/SCCI (Homogeneous Charge/Spark Controlled Compression Ignition), Luong et al. et [64] étudient en configuration DNS 2D l'influence des fluctuations de température T' , de richesse ϕ' , et de l'introduction d'une corrélation négative $T - \phi$, sur le régime de combustion. Cette dernière vise à représenter le refroidissement dû à l'évaporation du carburant. Le régime de combustion est déterminé à partir du bilan diffusion/réaction. Ainsi, l'augmentation de ϕ' raccourcit les délais d'AI, et favorise un allumage stratifié propice à un régime de déflagration. L'augmentation de T' favorise également un allumage stratifié et un régime de déflagration. Toutefois, son influence sur les délais d'AI non-monotone : Pour certaines températures initiales moyennes T_0 , l'accroissement des fluctuations T' induit un accroissement des délais d'AI dans les régions des plus réactives en raison du coefficient négatif de température du mélange (Negative Temperature Coefficient), ce qui atténue globalement des gradients de température et favorise un régime d'AI. Enfin la corrélation $T - \phi$ négative atténue les gradients de réactivité pour des valeurs de T_0 hautes et basses, ce qui favorise un allumage plus homogène. À l'inverse, pour des valeurs T_0 intermédiaires, la corrélation $T - \phi$ accroît les gradients de réactivité et favorise

un régime de déflagration. En outre, des temps turbulents sensiblement inférieurs aux délais d'AI favorisent un allumage homogène et une propagation d'AI, comme rapporté par Yoo et al. [129].

Dans un contexte HCCI, les régimes de combustion sont également identifiés en configuration DNS 2D et 3D par Bansal et al. [8] au moyen d'un bilan diffusion/réaction appliqué à un mélange air/diméthyléther stratifié en température. L'influence de la turbulence, de l'ajout d'une stratification en richesse, et d'un effet de compression isentropique sont investigués. Ainsi il apparaît que la turbulence accroît les gradients de réactivité par rapport aux cas non-turbulents, et favorise un régime de déflagration. Toutefois, d'après les auteurs, si l'amplitude des gradients de réactivité initiaux est suffisante pour générer une transition vers un régime de déflagration, l'influence de la turbulence est plutôt limitée. Cependant, le temps caractéristique turbulent est dans ces travaux comparable aux délais d'AI et l'influence de la turbulence pourrait être plus marquée pour des temps turbulents inférieurs, comme suggéré par Yoo et al. [129]. En outre, les cas impliquant une compression isentropique s'accompagnent de gradients de mélange inférieurs, en raison de l'augmentation de la viscosité (échauffement par compression) et d'une accélération des phénomènes de dissipation turbulente et scalaire. Cela favorise alors la propagation d'AI. Enfin, l'ajout d'une stratification en composition (sans corrélation $T - \phi$) accentue des gradients de réactivité dû à une augmentation de la richesse, ce qui favorise la dominance d'un régime de déflagration. À l'inverse, l'introduction d'une corrélation $T - \phi$ négative atténue les gradients de réactivité et favorise la propagation d'AI. Cette tendance corrobore les conclusions de Bansal et al. [6], et celles de Luong et al. [64] pour des températures initiales moyennes T_0 faibles, et élevées (hors zone NTC). Il est alors plausible que la diminution de température atténue l'augmentation de la réactivité due à la richesse (i.e. effet de compétition entre l'augmentation de la richesse et la diminution de la température).

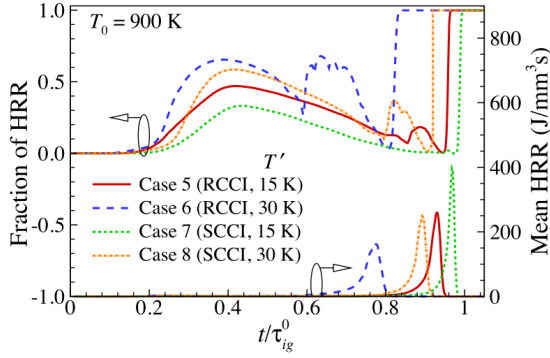
Dans un contexte Dual-Fuel, l'effet de la (double) stratégie d'injection iso-octane/PRF (Primary Reference Fuel) est étudié par Luong et al. [62] en configuration DNS 2D. En particulier, deux stratégies d'injection sont comparées : le RCCI (Reactivity Controlled Compression Ignition) et DDFS (Direct Dual-Fuel Stratification). Dans la stratégie RCCI, des fluctuations de carburant pilote PRF' sont superposées en condition initiale à un mélange homogène air/iso-octane. Dans la stratégie DDFS, un mélange air/iso-octane homogène est imposé en condition initiale, et un terme source pilote la création de PRF de façon à imiter l'évaporation d'un carburant pilote au cours du calcul. L'étude du bilan diffusion/réaction permet d'identifier les régimes de combustion, et révèle qu'un régime de propagation d'AI est dominant pour l'ensemble des conditions testées. Toutefois, l'injection progressive de carburant pilote confère à la stratégie DDFS la capacité de mitiger le pic de dégagement de chaleur accompagnant l'AI, et notamment d'étaler la combustion sur une plus longue période. Cette stratégie peut avoir l'avantage de limiter le dégagement d'énergie et les niveaux de pression atteints dans le cadre d'applications moteur.

Dans un contexte SCCI/RCCI, Luong et al. [63] étudient en configuration DNS 2D l'influence des fluctuations de température T' , de richesse ϕ' , de vitesse u' . Deux configurations sont étudiées : SCCI et RCCI. La configuration SCCI implique un mélange mono-carburant air/iso-octane hétérogène en température et richesse, et comprend une corrélation négative $T - \phi$. La configuration RCCI implique un mélange Dual-Fuel air/iso-octane homogène en composition et température, sur lequel est superposé une concentration fluctuante en carburant pilote PRF'. Une corrélation négative $T - PRF'$ est utilisée dans le cas RCCI pour représenter le refroidissement dû à l'évaporation du carburant pilote PRF. L'augmentation de l'amplitude des fluctuations T' Fig.2.9c, ϕ' , et PRF' entraîne une augmentation de la stratification du mélange et favorise un régime de déflagration identifié par un bilan diffusion/réaction, à la fois pour SCCI et RCCI. Contrairement aux résultats de Luong et al. [64], la réponse à T' , ϕ' , et PRF' est monotone en température, et aucun effet d'inversion n'est rapporté dans la zone NTC. L'utilisation de carburant différents peut être mise en cause. À nouveau [63, 129, 130], il est rapporté que l'augmentation de l'intensité turbulente u' tend à homogénéiser le mélange et favorise un régime de propagation d'AI.

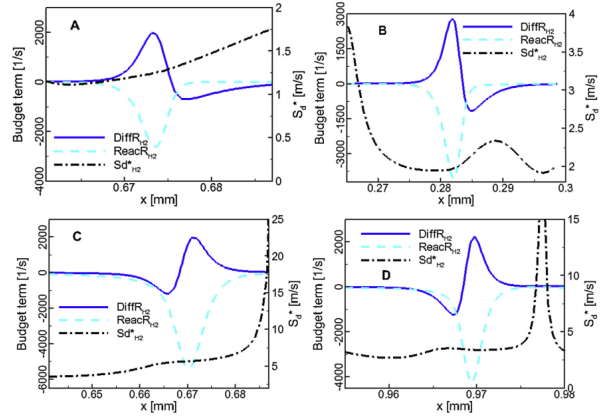


(a) Bilan diffusion/réaction, et taux de dissipation de la fraction de mélange $\chi = D|\nabla Z|^2$ le long d'une coupe à différents instants d'une transition AI→déflagration. Un taux de dissipation élevé favorise un régime de déflagration associé à un relatif équilibre diffusion/réaction. Repris de Jin *et al.* [49].

(b) Évolution de la fraction de surface de front associée à un régime de déflagration (condition $Da < 2.0$ Eq(2.16)). La transition AI→déflagration s'accompagne de l'établissement d'un relatif équilibre réaction diffusion. Repris de Bhagatwala *et al.* [12].



(c) Évolution de la fraction de dégagement de chaleur associée à un régime de déflagration (condition $Da < 2.0$ Eq(2.16)). L'augmentation de T' accroît la fraction brûlant en régime déflagration. Repris de Luong *et al.* [63].

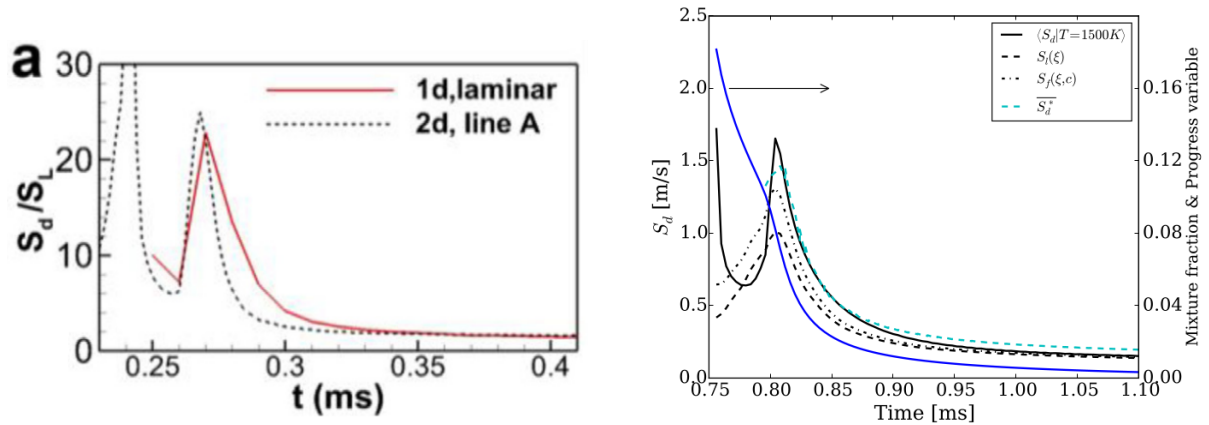


(d) Bilan diffusion/réaction réalisés sur des coupes à différentes locations. Les régions où le terme réactif est dominant (C, D) s'accompagnent de vitesses de déplacement supérieures et sont associées à un front d'AI. Repris de Zhang *et al.* [137].

FIGURE 2.9 – Évolution du bilan diffusion/réaction au cours du temps pour différentes configurations DNS impliquant des transitions AI→déflagration.

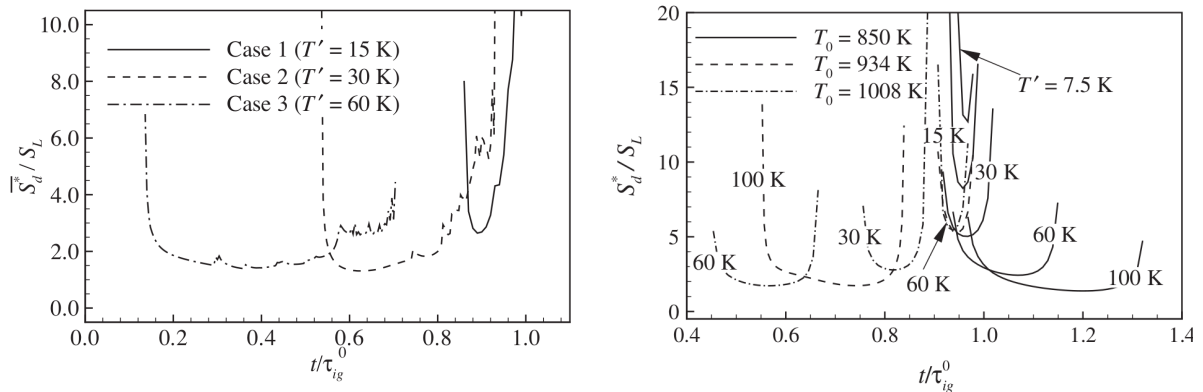
Dans un contexte RCCI n-heptane/iso-octane, Bhagatwala *et al.* [12] étudient l'influence des fluctuations de température T' , et de richesse en carburant pilote $\phi'_{n-heptane}$ dans une configuration DNS 2D à pression variable. Les régimes de combustion sont identifiés par un bilan diffusion/réaction Fig.2.9b, ainsi que par le rapport S_c/S_L , avec S_c la vitesse de consommation intégrée le long de la normale locale au front, et S_L la vitesse de consommation d'une flamme laminaire aux conditions locales. Une analyse de la distribution des gradients de délais d'AI $|\tau_{AI}|$ vient consolider l'analyse. L'augmentation de l'amplitude des fluctuations T' et ϕ' se traduit par une augmentation des gradients de délais d'AI, et favorise la transition vers un régime de déflagration, au détriment du régime de propagation d'AI.

Dans un contexte Dual-Fuel diméthyléther/méthane, Jin *et al.* [49] étudient la phénoménologie associée à la transition AI→déflagration, et la propagation de flammes triples en configuration DNS 2D. Une coupe permet l'analyse d'un élément de surface de front durant la transition AI→déflagration. Aux premiers instants, le terme réactif domine largement le terme diffusif, puis le changement de mode de propagation s'accompagne de l'établissement d'un relatif équilibre diffusion/réaction, comme reporté fréquemment [6, 8, 12, 62–64, 129, 130]. En outre, l'analyse de la vitesse de déplacement S_d affiche clairement un ralentissement du front de réaction, qui finit par rejoindre une vitesse de flamme pré-mélangée S_L Fig.2.10a. Ces résultats sont connexes à ceux des travaux de thèse de Soriano [112], acquis en configuration DNS 2D diméthyléther/méthane Fig.2.10b (voir lignes discontinues bleue $\overline{S_d^*}$ et noire $S_f(\xi)$).



(a) Évolution temporelle du rapport S_d/S_L (DNS 2D) le long d'une coupe à différents instants d'une transition AI→déflagration. La transition AI→déflagration s'accompagne d'un ralentissement du front. Le pic de S_d autour de $t = 0.28$ ms est attribué au passage du front dans la région stœchiométrique. Comparaison avec un cas 1D équivalent. Repris de Jin *et al.* [49].

(b) Comparaison temporelle entre S_d et S_L (respectivement en lignes discontinues bleue S_d^* et noire $S_f(\xi)$) le long d'une coupe à différents instants. La transition AI→déflagration s'accompagne d'un ralentissement du front (en partie du à l'appauvrissement du mélange), et d'un rapprochement entre S_d et S_L . Le pic de S_d autour de $t = 0.80$ ms est attribué au passage du front dans la région stœchiométrique. Repris de Soriano [112].



(c) Évolution temporelle du rapport S_d/S_L durant la transition AI→déflagration pour différents niveaux de fluctuations de température T' . Les fluctuations T' les plus faibles entraînent des vitesses de déplacement élevées associées à une propagation d'AI. Repris de Yoo *et al.* [130].

(d) Évolution temporelle du rapport S_d/S_L durant la transition AI→déflagration pour différents niveaux de température initiale moyenne T_0 , et de fluctuations de température T' . Les valeurs T_0 élevées avancent l'AI. Les fluctuations T' les plus faibles entraînent des vitesses de déplacement élevées associées à une propagation d'AI. Repris de Yoo *et al.* [129].

FIGURE 2.10 – Évolution de la vitesse de déplacement S_d au cours d'une transition AI→déflagration. L'AI est associée à des vitesses sensiblement supérieures à la vitesse de flamme laminaire S_L à iso-conditions.

La transition AI→déflagration est étudiée par Savard et al. [103] dans un contexte de combustion air/hydrogène en turbine à gaz. La configuration consiste en un canal 3D rectiligne, comportant une entrée à vitesse imposée, et une sortie libre. La turbulence est générée artificiellement via un terme de forçage appliqué au champ de vitesse. Dans cette étude, le régime de déflagration est considéré dominant lorsque le front de réaction est stabilisé à une distance inférieure à une valeur fixée. Au delà, un régime d'AI est considéré dominant. L'augmentation de l'intensité turbulente (u'/S_L) génère un accroissement des gradients d'avancement et favorise la transition vers un régime de déflagration. À l'inverse, les intensités turbulentes inférieures s'accompagnent de gradients d'avancement plus faibles favorisant la dominance d'un régime de propagation de front d'AI. Ce constat est opposé à ceux fréquemment rapportés [63, 129, 130]. Toutefois, dans la configuration utilisée par Savard et al. [103] les gradients d'avancement sont générés par la turbulence. Or, le cadre de DNS plus "classiques" (i.e. de type boîte carré/cubique) ces gradients d'avancement découlent de gradients de réactivité (température, composition) imposés en conditions initiales, pouvant être amplifiés/atténués selon l'intensité tourbillonnaire, l'échelle intégrale, l'échelle de stratification en réactivité... La comparaison directe entre les DNS "classiques" et la configuration de

Savard et al. [103] paraît donc délicate. La différence de réponse à l'augmentation de l'intensité turbulente est donc difficile à interpréter. L'étude corrobore toutefois le fait que des gradients de mélange importants (ici sous la forme de gradients d'avancement) favorisent un régime de déflagration.

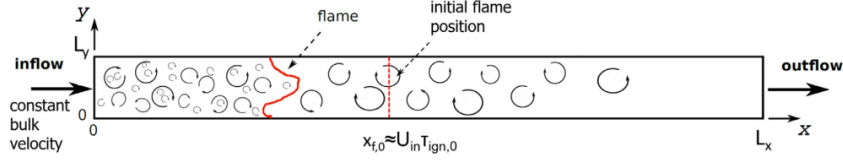


FIGURE 2.11 – Illustration de la configuration numérique utilisée. Repris de Savard *et al.* [103].

Une étude de la combustion Dual-Fuel est également proposée par Demosthenous et al. [30] en configuration DNS 3D diphasique. Une analyse du chemin réactionnel basée sur le taux de dégagement de chaleur ainsi que les taux de réaction/fractions massiques d'espèces spécifiques (CH_4 , CH_3 , HO_2 , CH_2O) est conduite afin d'identifier le régime de combustion dominant. L'évolution des quantités susmentionnées observée dans les calculs DNS, est comparée en fonction de l'avancement, à celle de flammes 1D canoniques et réacteurs 0D à iso-conditions. Le comportement du dégagement de chaleur et des espèces considérées suggère que les cas A est essentiellement piloté par un régime d'AI Fig.2.12a et le cas B par un régime déflagration Fig.2.12b. Ce type d'analyse ne permet toutefois pas de délimiter de façon nette les différents régimes.

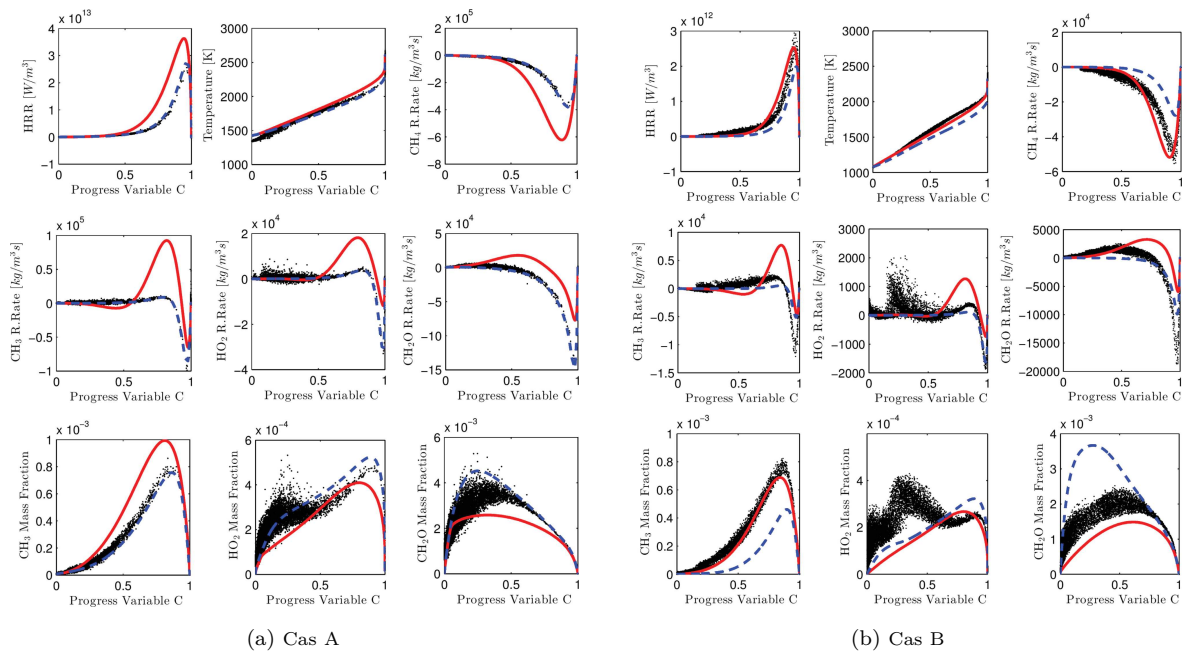


FIGURE 2.12 – Nuages de points représentatifs de l'évolution de la combustion pour les cas A et B. La comparaison avec des calculs de réacteurs 0D (bleu) et de flamme 1D canonique (rouge) à conditions GF identiques révèle un comportement typé AI pour le cas A, et déflagration pour le cas B. Repris de Demosthenous *et al.* [30].

2.4 Conclusions du chapitre

Une riche littérature relative à la transition AI→déflagration en configurations mono/bi-carburant existe, et est construite à la fois sur des investigations expérimentales et numériques. Ainsi, il apparaît que la dominance des différents régimes (AI/déflagration) est pilotée par l’amplitude des gradients de réactivité. De faibles gradients de réactivité entraînent un allumage homogène favorisant un régime de propagation d’AI, tandis que de forts gradients favorisent un allumage plus stratifié et un régime de déflagration. Ce constat a été formalisé théoriquement pour la première fois en 1980 par Zeldovich [136], et vérifié dans l’ensemble des investigations expérimentales ou numériques analysées dans ce chapitre.

Plusieurs diagrammes de combustion a priori ont été construits [17, 39, 46, 52] afin d’inclure l’influence de la turbulence et/ou des gradients de composition/température sur le régime de combustion dominant. En outre, des outils numériques ont été développés pour identifier les régimes de combustion dans un contexte DNS. Ainsi, la plupart des études numériques sont construites sur une analyse du bilan diffusion/réaction, et de la vitesse de déplacement du front de réaction [6, 8, 12, 49, 62–64, 129, 130, 138], tel que proposé par Chen et al. [23] et Hawkes et al. [42] dans une étude DNS pionnière de la transition AI→déflagration en contexte HCCI. Les conditions favorisant la dominance du terme réactif sur le terme diffusif, de même que des vitesses de déplacement S_d sensiblement supérieures à la vitesse de flamme laminaire S_L sont associées à un régime de propagation d’AI. À l’inverse, les conditions mettant en jeu un relatif équilibre entre les phénomènes réactifs et diffusifs, de même que des vitesses de déplacement comparables à S_L sont associées à un régime de déflagration.

D’un point de vue pratique, les faibles/forts gradients de composition ou température favorisent généralement un régime de propagation d’AI/déflagration (sauf dans certaines conditions de NTC). L’intensité tourbillonnaire joue également un rôle clef dans le mode de combustion, puisqu’elle peut introduire le brassage nécessaire à la formation de gradients de réactivité et favoriser un régime de déflagration [103], ou à l’inverse dissiper ces gradients lorsque le temps caractéristique turbulent est court devant le temps caractéristique d’AI [63, 130].

Vis-à-vis du contexte numérique de cette thèse, l’analyse du bilan diffusion/réaction et de la vitesse de déplacement paraissent adaptées à une étude de la transition AI→déflagration en configuration Dual-Fuel. Le chapitre 4 est notamment dédié à une analyse fondamentale de ce phénomène.

Deuxième partie

Transition AI→déflagration : Étude fondamentale et Éléments de modélisation

Approches de modélisation de la combustion *Dual-Fuel*

Les problèmes de combustion turbulente rencontrés dans la plupart des applications moteur font intervenir des phénomènes complexes dont l'étude numérique est délicate. L'approche DNS (Direct Numerical Simulation) impliquant la résolution directe des équations de l'aérothermochimie sur toutes les échelles turbulentes (parfois de l'ordre du micron), est très coûteuse en temps de calcul et se limite à une utilisation académique sur des domaines de taille restreinte. A l'opposé, l'approche RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) reposant sur la résolution d'écoulements moyennés temporellement, implique une modélisation des phénomènes sur l'ensemble des échelles turbulentes. Applicable sur des maillages plus grossiers, elle génère des temps de calculs faibles permettant son usage en applications moteur. Cependant, la vision moyennée offerte en RANS limite l'étude de certains phénomènes moteurs sporadiques tels que le cliquetis, ou les variations cycliques. Approche intermédiaire entre DNS et RANS, la LES (Large Eddy Simulation) repose sur la résolution directe des équations de l'aérothermochimie pour des échelles turbulentes supérieures à une taille de filtre (généralement de l'ordre de la taille de maille Δ_x), et sur la modélisation des phénomènes se déroulant à des échelles inférieures à celle-ci. Contrairement au RANS, l'approche LES offre une vision instantanée de l'écoulement, qui dégénère a priori vers la DNS lorsque la résolution du maillage augmente. A noter cependant que cette propriété n'est pas systématiquement satisfaite, puisque tous les modèles LES ne dégénèrent pas nécessairement vers la limite DNS. En outre, son application à des moteurs à combustion interne nécessite, pour chaque point moteur, la simulation de plusieurs cycles complets pour prendre en compte les variations cycliques inhérentes à ce type d'applications, et constituer une base de données représentatives du point de fonctionnement considéré. Le nombre de cycles simulés pour un point de fonctionnement se situe généralement autour de 30 [58, 73, 79, 97], ce qui augmente considérablement le coût de calcul global pour des applications en moteur à combustion interne. Ce coût de calcul reste toutefois acceptable dans le cadre de travaux de recherche et certaines applications industrielles. Les développements effectués dans ce travail sont pensés en vue d'une application LES.

3.1 Équations de l'Aérothermochimie

Les solveurs AVBP et CONVERGE utilisés dans ce travail assurent la résolution directe des équations de l'aérothermochimie dans des configurations de type DNS. Bien que ce travail ne comporte pas de calculs DNS, des calculs 1D réalisés au chapitre 4 s'appuient sur la résolution directe de ces équations. Les équations de l'aérothermochimie filtrées au sens de la LES sont présentées en section 3.2, et sont résolues dans les calculs discutés aux chapitres 6 et 7.

3.1.1 Conservation des espèces

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_k + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho_k u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} \rho Y_k V_{j,k} + \dot{\omega}_k \quad (3.1)$$

avec \mathcal{D}_k le coefficient de diffusion associé à l'espèce k . Le transport diffusif $Y_k V_{j,k}$ de l'espèce k , dans la direction j , est fermé via la loi de Fick exprimée comme Eq.(3.2) :

$$Y_k V_{j,k} = - \mathcal{D}_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_j} \quad (3.2)$$

3.1.2 Conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho u_j + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_i u_j) = - \frac{\partial}{\partial x_j} p - \frac{\partial}{\partial x_j} \tau_{ij} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} \quad (3.3)$$

avec p les efforts de pression, τ_{ij} le tenseur des contraintes visqueuses, et $f_{k,j}$ les efforts volumiques (usuellement la gravité) dans la direction j .

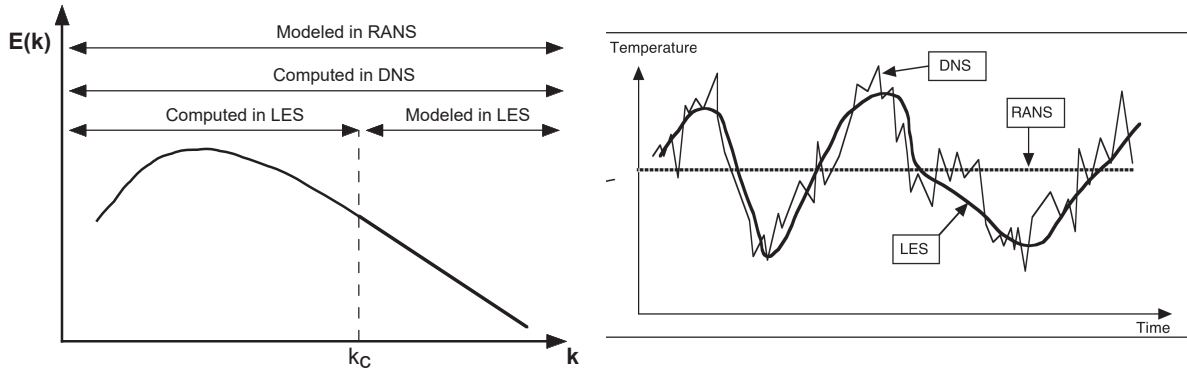
3.1.3 Conservation de l'énergie totale

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho E + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho u_j E) = \frac{\partial}{\partial x_j} \sigma_{ij} u_j + \frac{\partial q_j}{\partial x_j} + \rho \sum_{k=1}^N Y_k f_{k,j} (u_j + V_{k,j}) + \dot{\omega}_T + \dot{Q} \quad (3.4)$$

avec σ_{ij} le tenseur des contraintes, q_j le flux thermique dans la direction j , $\dot{\omega}_T$ le taux de dégagement de chaleur thermique, et \dot{Q} les flux radiatifs.

3.2 Équations de la LES

La simulation aux grandes échelles (LES) utilise un filtre spatial permettant la séparation des échelles de turbulence. L'étendue de ce filtre est conditionnée par la taille de maille Δ_x , et élimine l'information contenue dans les échelles tourbillonnaires de taille inférieures à Δ_x . Les plus grandes échelles turbulentes ($> \Delta_x$), contenant l'essentiel de l'énergie cinétique de l'écoulement Fig.3.1a sont résolues par application directe des équations de Navier-Stokes, tandis que les plus petites échelles ($< \Delta_x$) sont prises en compte par une modélisation de sous-maille. Une illustration comparant les approches RANS (signal moyenné temporellement), LES (fluctuations de grande échelle), et DNS (intégralité des échelles de fluctuations) est proposée Fig.3.1.



(a) Échelle turbulente LES, DNS, RANS

(b) Signal DNS, LES, RANS

FIGURE 3.1 – Illustration simplifiée des différents des signaux captés en RANS, LES, et DNS. Repris de Poinso et Veynante [89].

3.2.1 Opérations de filtrage

En LES, la contribution d'une quantité f aux grandes échelles est notée \bar{f} , et est obtenue par produit de convolution entre cette grandeur et un filtre passe-bas G_Δ Eq.(3.5) :

$$\bar{f}(x) = \int_{\Omega} f(x') G_\Delta(x - x') dx' \quad (3.5)$$

avec Ω la cellule de calcul, et x le vecteur position. Pour un écoulement compressible, un filtrage au sens de Favre est appliqué Eq.(3.6) :

$$\bar{\rho} \tilde{f}(x) = \int_{\Omega} \rho f(x') G_\Delta(x - x') dx' \quad (3.6)$$

3.2.2 Filtrage LES des équations de l'aérothermochimie

L'opération de filtrage au sens de Favre appliquée aux équations Eq.(3.1) à Eq.(3.4) donne le jeu d'équations suivantes :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) = - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{Y}_k - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k) \right] - \frac{\partial \bar{J}_{i,k}}{\partial x_i} + \bar{\omega}_k \quad (3.7)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} [\tilde{u}_i \tilde{u}_j - \tilde{u}_i \tilde{u}_j] \right) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_i} \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{E}) &= - \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\bar{\rho} (\tilde{u}_i \tilde{E} - \tilde{u}_i \tilde{E}) \right] + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\lambda} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} \right) - \\ &\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\sum_{k=1}^{n_{esp}} \tilde{h}_{s,k} \bar{J}_{i,k} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\tilde{u}_i (\bar{p} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij})) + \bar{\omega}_T + \bar{Q} \end{aligned} \quad (3.9)$$

3.2.3 Fermeture des flux diffusifs

Le filtrage des équations de l'aérothermochimie fait apparaître des termes diffusifs non-résolus qu'il convient alors de modéliser. Pour ce faire, une méthode construite sur les gradients filtrés est utilisée :

$$\bar{J}_{i,k} = -\bar{\rho} \left(\bar{\mathcal{D}}_k \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) \quad (3.10)$$

$$\bar{\lambda} \frac{\partial \bar{T}}{\partial x_i} = \bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} \quad (3.11)$$

$$\sum_{k=1}^{n_{esp}} \bar{h}_{s,k} \bar{J}_{i,k} = \sum_{k=1}^{n_{esp}} \tilde{h}_{s,k} \bar{J}_{i,k} \quad (3.12)$$

Le tenseur des contraintes visqueuses $\bar{\tau}_{ij}$ d'un fluide Newtonien est exprimé à partir du champ de vitesse filtré.

$$\bar{\tau}_{ij} = \bar{2}\mu S_{ij} + \beta \delta_{ij} \bar{S}_{kk} \approx 2(\bar{\mu} + \mu_t) \tilde{S}_{ij} + \beta \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \quad (3.13)$$

$$\text{avec } \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.14)$$

L'application de l'approximation de Stokes ($\beta \approx -\frac{2}{3}(\bar{\mu} + \mu_t)$) mène à l'expression suivante :

$$\bar{\tau}_{ij} = 2(\bar{\mu} + \mu_t) \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{kk} \right) \quad (3.15)$$

avec $\bar{\mu}$ et μ_t les viscosités laminaires et turbulentes.

3.3 Modèles de flamme turbulente

3.3.1 Régime des flammelettes

Plusieurs régimes de propagation de flamme turbulentes ont été identifiés. Une analyse des différents régimes de combustion, basée notamment sur la comparaison des temps de flamme et des temps turbulents, est représentée

par le diagramme de Peters [86]. Ce dernier met notamment en lumière le régime des flammelettes Fig.3.2 délimité par des nombres de Karlovitz et Damköhler respectivement tels que $Ka < 1$ et $Da \gg 1$.

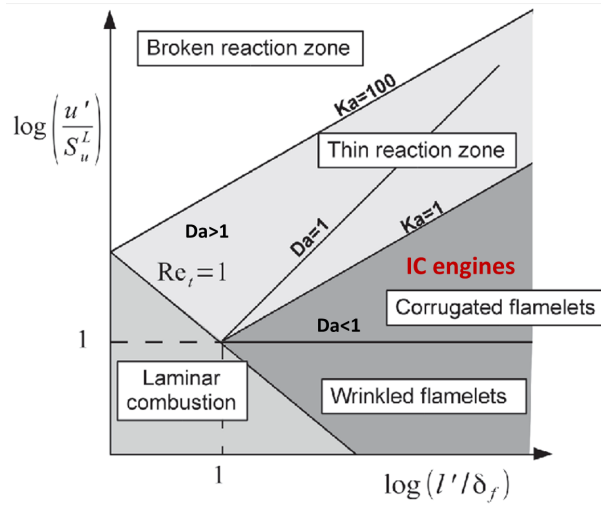


FIGURE 3.2 – Diagramme de régimes de combustion tel que proposé par Borghi [15]. Les moteurs à combustion interne fonctionnent usuellement dans la région "Corrugated Flamelets" (flammelettes ondulées). Repris (et modifié) de Peters [86].

Le nombre de Karlovitz compare le temps chimique au temps des plus petites structures tourbillonnaires (échelle de Kolmogorov) :

$$Ka = \frac{\tau_f}{\tau_k} \quad (3.16)$$

Le nombre de Damköhler compare le temps chimique au temps des échelles turbulentes intégrales :

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_f} \quad (3.17)$$

Le régime des flammelettes est caractérisé par des temps de flammes faibles devant les temps caractéristiques de toutes les échelles tourbillonnaires. Il y a alors non-pénétration du front de flamme par la turbulence, ce qui implique que la turbulence n'interagit pas avec la structure interne du front de flamme. Chaque élément de surface de flamme se comporte alors comme une flamme laminaire étirée et/ou plissée sous l'effet du brassage tourbillonnaire, mais une structure de flamme dite "cohérente" est maintenue.

3.3.2 Modèles de flammelettes

La plupart des moteurs à combustion interne fonctionne dans le régime "Corrugated flamelets". Des modèles de combustion adaptés au régime des flammelettes couramment rencontré en applications industrielles ont été développés.

3.3.2.1 G-equation

Le modèle G-equation est introduit par Williams [125] et repose sur le transport d'une variable G représentant la distance au front de flamme. Cette approche a été développée pour la propagation de flammes pré-mélangées et étendue pour des flammes non pré-mélangées dans le régime des flammelettes. Cette approche cinématique n'implique pas la résolution du front de flamme, mais vise uniquement à définir sa localisation, l'iso-valeur $G = 0$ représentant sa position actuelle. Ainsi, les valeurs positives de G indiquent la distance au front de flamme côté GF tandis que les valeurs négatives indiquent la distance côté GB. La propagation du scalaire G obéit à l'équation Eq.3.18, avec S_T la vitesse de flamme turbulente modélisée comme Eq.(3.19), et les coefficients α et n des constantes de l'ordre de 1.

$$\bar{\rho} \frac{\partial G}{\partial t} + \bar{\rho} \bar{u}_i \frac{\partial G}{\partial x_i} = \rho_0 S_T |\nabla G| \quad (3.18)$$

$$S_T = S_L \left(1 + \alpha \left(\frac{u'}{S_L} \right)^n \right) \quad (3.19)$$

L'approche G-equation est aujourd'hui largement utilisée dans l'industrie, et a été utilisée dans des configurations Dual-Fuel RANS [96, 110, 113] pour représenter le régime de déflagration subséquent à l'AI.

3.3.2.2 ECFM

Le modèle CFM (Coherent Flamelet Model) introduit par Candel et Poinso [21] à été développé spécifiquement pour le régime des flammelles pré-mélangées dans un contexte RANS, et repose sur le transport d'une densité de surface de flamme Σ , représentant localement la surface de flamme δA par unité de volume δV . CFM a ensuite été étendu par Colin et al. [25] à des conditions non pré-mélangées (ECFM3Z, Extended Coherent Flamelet Model - 3 Zones), et utilisé avec succès dans des configurations RANS HCCI et Diesel, moyennant un couplage avec le modèle TKI pour représenter l'AI [27]. Des adaptations pour la LES ont notamment été proposées dans les travaux de Richard [94]. Le modèle ECFM (éventuellement couplé avec TKI) a été utilisé avec succès en configurations LES moteur, et sa prédictivité dans l'étude des variations cycle-à-cycle [80], ou du cliquetis [58, 97], a été prouvée.

Description bimodale de la combustion

ECFM considère le front de flamme comme une frontière infiniment mince séparant les gaz frais et brûlés. Chaque cellule est alors divisée en une zone GF, et une zone GB, où seules les espèces CO , CO_2 , O_2 , H_2O , H , H_2 , N_2 , OH , N , O et le/les carburant(s) sont considérés. Le carburant est assimilé à une espèce unique (surrogate) représentative du carburant réel comportant une multitude d'espèces (deux surrogates en configurations Dual-Fuel).

Composition à l'état gaz frais

ECFM comporte des traceurs pour les espèces O_2 , CO , CO_2 , N_2 , H_2O , H_2 et le/les carburant(s), qui sont transportés identiquement aux espèces qu'ils représentent Eq.(3.20), à la différence qu'ils ne comportent pas de terme source et n'entrent dans aucune équation bilan, contrairement aux espèces "réelles".

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\bar{\rho} \left(\frac{\nu}{Sc} + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \right) + \underbrace{\bar{\omega}_k}_{= 0 \text{ pour un traceur}} \quad (3.20)$$

L'introduction de traceurs pour certaines espèces spécifiques permet de remonter à la composition locale à l'état GF. La fraction d'un traceur d'espèce k s'écrit Eq.(3.21) :

$$\tilde{Y}_{T,k} = \tilde{Y}_k^u |^u = \frac{\tilde{m}_k^u}{\tilde{m}^u} \quad (3.21)$$

avec \tilde{m}^u la masse imbrulée. Il convient également de faire la différence entre $\tilde{Y}_k^u |^u$ et \tilde{Y}_k^u . Le premier Eq.(3.22) désigne la fraction de l'espèce k imbrulée conditionnée côté GF, et le second Eq.(3.23) la fraction de l'espèce k globale (i.e. côté GF et GB) :

$$\tilde{Y}_k^u = \frac{\tilde{m}_k^u}{\tilde{m}^u + \tilde{m}^b} \quad (3.22) \quad \tilde{Y}_k^u |^u = \frac{\tilde{m}_k^u}{\tilde{m}^u} \quad (3.23)$$

L'avancement de réaction \tilde{c} n'est pas calculé à partir d'une équation de transport, mais à partir de la fraction de carburant conditionnée dans les gaz frais Y_F^u et du traceur $Y_{T,F}^u$ s'exprimant comme Eq.(3.24) :

$$\tilde{c} = 1 - \frac{\tilde{Y}_F^u}{\tilde{Y}_{T,F}^u} \quad (3.24)$$

La description bimodale GF/GB implique que la composition du système comporte une contribution GF notée Y_k^u , et une contribution GB notée Y_k^b . Ainsi, pour chaque espèce k la décomposition GF/GB implique la relation Eq.(3.25) :

$$\tilde{Y}_k = (1 - \tilde{c})\tilde{Y}_k^u + \tilde{c}\tilde{Y}_k^b \quad (3.25)$$

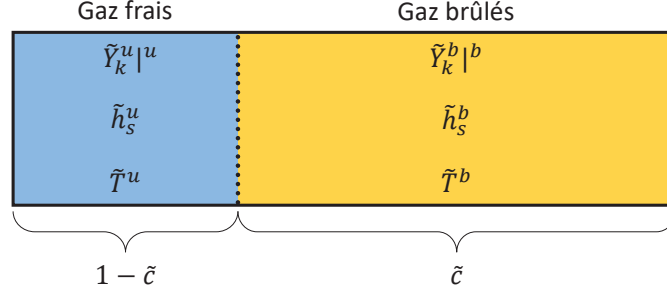


FIGURE 3.3 – Ségrégation d’une cellule en deux états gaz frais/gaz brûlés

La composition à l’état GF est connue via les traceurs et permet le calcul de la température des GF moyennant une équation de transport l’enthalpie sensible Eq(3.26). En effet, l’inversion des valeurs \tilde{h}_s^u et \tilde{h}_s^b permet d’obtenir les températures aux états GF et GB respectivement \tilde{T}^u et \tilde{T}^b . Les conditions thermodynamiques à l’état GF permettent d’obtenir la vitesse de flamme laminaire S_L locale, ingrédient du modèle ECFM comme illustré en Eq.(3.32) et Eq.(3.33) :

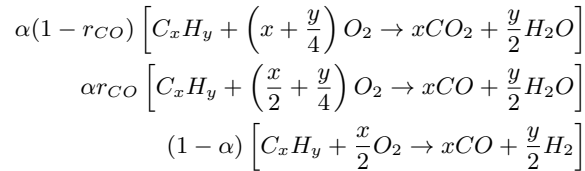
$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_s}{\partial x_i} = \frac{\partial P}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\tilde{\rho} \left(\frac{\nu}{Sc} + \frac{\nu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{h}_s}{\partial x_i} \right) + \tilde{Q} + \tilde{\omega}_{h_s} \quad (3.26)$$

Identiquement à l’équation Eq.(3.25), l’enthalpie peut s’exprimer en fonction des contributions GF et GB :

$$\tilde{h} = (1 - \tilde{c})\tilde{h}^u + \tilde{c}\tilde{h}^b \quad (3.27)$$

Composition à l’état gaz brûlés

L’état GB est calculé à partir d’une chimie simplifiée permettant de retrouver les principales propriétés du mélange à l’état d’équilibre. La composition GB répond aux réactions suivantes :



avec les paramètres α et r_{CO} des constantes dont les valeurs varient fonction de la richesse du mélange, et ϕ_{crit} une richesse critique dépendant du carburant comme décrit dans l’algorithme 1.

Algorithme 1 : Description algorithmique du paramètre α

$$\phi_{crit} = \frac{2}{x} \left(x + \frac{y}{4} \right)$$

$$r_{CO} = 0.9$$

if $\bar{\phi}$ **then**

$$\alpha = 1$$

if $1 \leq \bar{\phi} < \phi_{crit}$ **then**

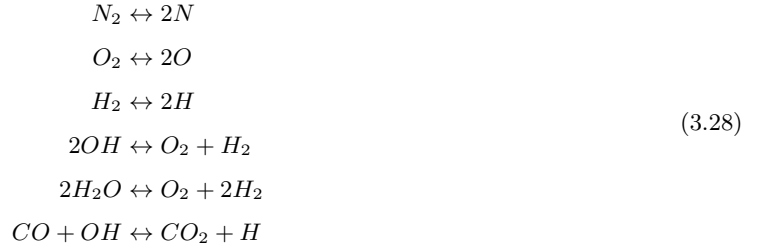
$$\alpha = \frac{\frac{4(x+\frac{y}{4})}{\bar{\phi}} - 2x}{2x + y}$$

if $\bar{\phi} > \phi_{crit}$ **then**

$$\alpha = 0$$

Équilibre post-flamme

Le calcul de l'état d'équilibre post-flamme permet de corriger la composition et la température des gaz brûlés, et notamment prédire l'apparition de certains polluants. Un jeu d'équations bilan est pour cela introduit.



Les réactions post-flammes entrent en action pour des avancement de l'ordre de 1, tels que $\tilde{c} > 1 - \epsilon$ avec le paramètre $\epsilon \sim 1.0 \times 10^{-5}$.

Transport de surface de flamme La densité de surface de flamme filtrée $\bar{\Sigma}$ nécessaire à la propagation du front de flamme se définit comme Eq.(3.29) :

$$\bar{\Sigma} = |\overline{\nabla c}| \tag{3.29}$$

Un opérateur de moyenne appliqué à l'équation de transport de $\bar{\Sigma}$ est introduit :

$$\langle Q \rangle_s = \frac{\int_0^1 Q |\nabla c| \delta(c - c^*) dc^*}{\bar{\Sigma}} \tag{3.30}$$

En partant de l'équation de transport résolue pour la variable d'avancement, une formulation de l'équation de transport de $\bar{\Sigma}$ exacte à été proposée par Candel et Poinso [21], suivie d'une formulation filtrée par Veynante et Poinso [122] définie comme Eq.(3.31) :

$$\underbrace{\frac{\partial \bar{\Sigma}}{\partial t}}_A + \underbrace{\nabla \cdot (\langle u \rangle_s \bar{\Sigma})}_B = - \underbrace{\langle (nn : \nabla u - \nabla \cdot u)_s \bar{\Sigma} \rangle}_C + \underbrace{\nabla \cdot (\langle S_d n \rangle_s \bar{\Sigma})}_D - \underbrace{\langle S_d \nabla \cdot n \rangle_s \bar{\Sigma}}_E \tag{3.31}$$

- A : Terme instationnaire
- B : Transport convectif
- C : Étirement total (résolu+non-résolu)
- D : Propagation plane
- E : Terme de courbure

S_d représente la vitesse de déplacement du front de flamme telle que $S_d = (\rho_u/\rho)S_L$, et n la normale au front de flamme telle que $n = -\frac{\nabla \tilde{c}}{|\nabla \tilde{c}|}$. La fermeture des contributions non-résolues des termes A à E figurent dans les travaux de Richard [94], et ne sont pas détaillées ici. Finalement, du calcul de $\bar{\Sigma}$ découlent les termes sources liés à la propagation du front de flamme turbulent, s'écrivant comme Eq.(3.32) et Eq.(3.33) :

$$\bar{\omega}_c = \bar{\rho}_u S_L \bar{\Sigma} \quad (3.32)$$

$$\bar{\omega}_k = \bar{\rho}_u \tilde{Y}_k^u S_L \bar{\Sigma} \quad (3.33)$$

Enfin, les valeurs de S_L sont obtenues par des corrélations représentatives du carburant considéré (par exemple Metghalchi et Keck [69]), ou par tabulation sur une plage de conditions thermodynamiques (température, pression, richesse, taux d'EGR...) permettant de couvrir l'ensemble des conditions thermodynamiques rencontrées dans le calcul.

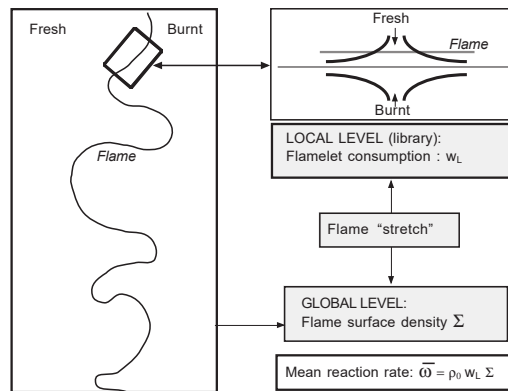


FIGURE 3.4 – Schéma de principe du modèle CFM. Repris de Poinso et Veynante [89].

3.3.3 Modèle de flamme épaissie (TFM - (*Thickened Flame Model*))

3.3.3.1 Principe

Le développement du modèle de flamme épaissie TFM (*Thickened Flame Model*) remonte aux travaux de Butler et al. [19] pour le calcul de flammes laminaires. Le fonctionnement de TFM repose sur l'épaississement artificiel du front de flamme d'un facteur \mathcal{F} permettant sa résolution numérique sur 5 à 10 points de maillage LES, usuellement de l'ordre de $100\mu\text{m}$ à $500\mu\text{m}$. Les épaisseurs de flamme de l'ordre de $10\mu\text{m}$ à $50\mu\text{m}$ rencontrées en moteurs à combustion interne impliquent alors des valeurs de \mathcal{F} typiquement comprises entre 10 et 100.

$$\mathcal{F} = \frac{n_{res}\Delta x}{\delta_L} \quad (3.34)$$

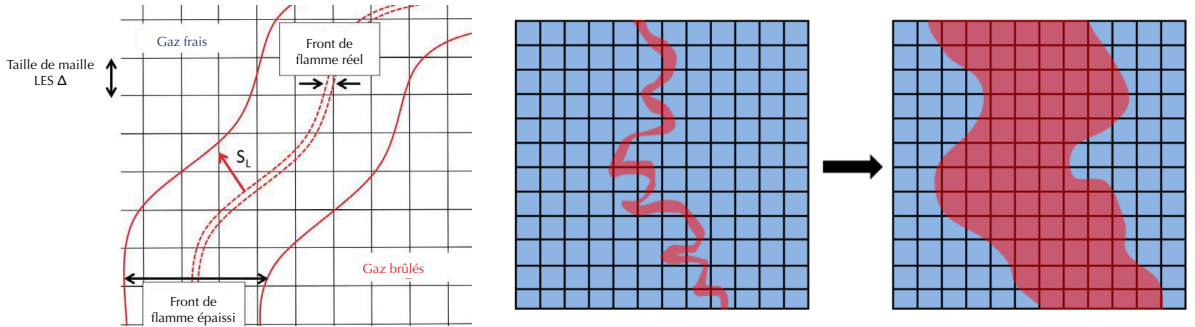
Reposant sur une résolution directe de la chimie, TFM permet de garder l'ensemble des propriétés thermodynamiques de la flamme, telles que la température adiabatique, la vitesse de déplacement, les profils d'espèces (au facteur d'épaississement \mathcal{F} près). En s'appuyant sur la théorie des flammes laminaires pré-mélangées proposée par Williams [125], il apparaît que l'épaisseur δ_L et la vitesse S_L sont reliées à la diffusivité \mathcal{D}_T , voir Eq.(4.15) et Eq.(3.36) :

$$\delta_L \propto \frac{\mathcal{D}_T}{S_L} \quad (3.35)$$

$$S_L \propto \sqrt{\frac{\mathcal{D}_T}{\mathcal{A}}} \quad (3.36)$$

avec \mathcal{A} la constante pré-exponentielle contenue dans la loi d'Arrhénius.

La multiplication par \mathcal{F} de la diffusivité implique alors la division des taux de réaction par ce même facteur afin de conserver les égalités Eq.(4.15) et Eq.(3.36).



(a) Comparaison d'un front de flamme résolu sur un maillage DNS, et d'un front de flamme épaissi résolu sur un maillage LES. (b) L'application d'un facteur d'épaississement modifie l'interaction flamme/turbulence et résulte en une perte de surface de flamme.

FIGURE 3.5 – Illustration d'un front de flamme épaissie. Repris de Misdariis [73].

Toutefois, l'interaction flamme-turbulence souvent caractérisée par le nombre de Damköhler est fortement impactée par la sur-diffusivité appliquée au front de flamme.

$$Da = \frac{\tau_f}{\tau_t} = \frac{l_t}{u'} \frac{S_l}{\delta_l} \quad (3.37)$$

avec τ_t et τ_f représentant respectivement le temps caractéristique de l'échelle intégrale, et τ_c un temps de flamme laminaire.

La multiplication de l'épaisseur de flamme par \mathcal{F} engendre de facto une diminution de Da du même facteur. Le plissement par les échelles tourbillonnaires d'une taille caractéristiques inférieure à $\mathcal{F}\delta_L$ est perdu, tandis que les échelles de taille supérieure perdent de leur efficacité, engendrant une perte de surface de flamme et de la vitesse de consommation qui en découle. Pour ces raisons, des fonctions d'efficacité modélisant la surface de flamme perdue par épaississement ont été développées. Il existe parmi celles-ci la fonction Colin et al. [26], et Charlette et al.

[22] respectivement décrites par les équations Eq.(3.38), et Eq.(3.39). Le facteur Ξ_Δ représente le rapport entre la surface de flamme résolue non-épaissie (au sens DNS), et la surface de flamme résolue par épaississement sur un maillage LES.

$$\Xi_\Delta = \frac{1 + \alpha \Gamma_\Delta \left(\frac{\Delta}{\delta_L}, \frac{u'_\Delta}{S_L} \right) \frac{u'_\Delta}{S_L}}{1 + \alpha \Gamma_\Delta \left(\frac{\Delta}{\mathcal{F}\delta_L}, \frac{u'_\Delta}{S_L} \right) \frac{u'_\Delta}{S_L}} \quad (3.38)$$

$$\Xi_\Delta = \left(1 + \min \left[\frac{\Delta}{\delta_L} - 1, \Gamma_\Delta \left(\frac{\Delta}{\delta_L}, \frac{u'_\Delta}{S_L}, Re_\Delta \right) \frac{u'_\Delta}{S_L} \right] \right)^\beta \quad (3.39)$$

avec Δ l'épaisseur du filtre LES, égal à $\mathcal{F}\delta_L$ en TFM. α représente une constante du modèle s'exprimant comme Eq.(3.40) :

$$\alpha = \beta \frac{2 \ln(2)}{3c_{ms}(Re_t^{0.5} - 1)} \quad (3.40)$$

avec $c_{ms} = 0.28$ et β une constante de l'ordre de 1.0.

3.3.3.2 Formulation standard

Le modèle TFM standard implique un épaississement uniforme dans l'ensemble du domaine. En d'autres termes, le facteur \mathcal{F} est appliqué à la zone réactive comme aux zones non-réactives (gaz frais, gaz brûlés, front de flamme...). L'omniprésence du facteur d'épaississement entraîne une accélération de la cascade tourbillonnaire, de même qu'une amplification des phénomènes de mélange, rendant son utilisation inadaptée à des problèmes de combustion hétérogène et/ou turbulente. Ces caractéristiques ont encouragé le développement d'un modèle dynamique capable de discriminer le front de flamme, afin d'appliquer l'épaississement à la zone réactive uniquement et ainsi conserver au mieux les propriétés du mélange (brassage turbulent, hétérogénéités...).

3.3.3.3 Formulation dynamique

Dans le modèle TFM dynamique, la détection du front de flamme est basée sur la comparaison d'un terme source local $|\dot{\omega}_k|$, avec la valeur maximale de ce terme source dans une flamme laminaire pré-mélangée canonique $|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}$. Le terme source considéré est souvent celui du carburant, ou bien le taux de dégagement de chaleur. Les valeurs de $|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}$ sont usuellement tabulées sur les conditions thermodynamiques rencontrées dans le calcul. Le senseur \mathcal{S}_{NF} permettant la comparaison de ces termes sources est non-transporté, varie entre des valeurs de 0 et 1, et s'exprime comme Eq.(3.41) :

$$\mathcal{S}_{NF} = \max \left[\min \left(\beta' \frac{|\dot{\omega}_k|}{|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}} - 1, 1 \right), 0 \right] \quad (3.41)$$

L'épaississement local \mathcal{F} , et sa valeur "cible" \mathcal{F}_{target} sont alors liées au senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} par l'équation Eq.(3.42). \mathcal{F} prend alors sa valeur nominale \mathcal{F}_{target} dans le front de flamme, et la valeur de 0 en amont/aval de celui-ci, permettant de circonscrire le facteur d'épaississement au front uniquement, et conserver les propriétés de l'écoulement au voisinage du front.

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{target} - 1)\mathcal{S}_{NF} \quad (3.42)$$

Cependant, les termes sources d'une flamme pré-mélangée sont intrinsèquement très raides, et $|\dot{\omega}_k|$ ne prend des valeurs de l'ordre de $|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}$ que sur une étendue très mince du front de flamme, généralement situé à des avancements de l'ordre de $c \approx 0.8$. Pour contrecarrer cette raideur et permettre une détection du front moins restrictive, l'ajout d'un paramètre de sensibilité β' imposé au senseur de réaction permet d'élargir l'étendue du front sur laquelle celui-ci prend des valeurs positives. Des valeurs de l'ordre de 500 sont usuellement imposées à β' , permettant une détection du front de flamme par \mathcal{S}_{NF} à la fois robuste, et suffisamment discriminante des états gaz frais/brûlés. Toutefois, l'ajout du paramètre β' ne permet pas à l'épaississement de couvrir l'intégralité du front de flamme (i.e. entre $c \approx 0$ et $c \approx 1$). Cela empêche une résolution suffisante de la zone de pré-chauffage, pourtant siège de phénomènes diffusifs essentiels à la propagation. De plus, la zone post-flamme ($0.9 \lesssim c \lesssim 1$) impliquant un dégagement de chaleur de relativement faible intensité, sans toutefois être négligeable peut aussi

pâtir d'une sous-résolution. Ces raisons ont poussé le développement d'une méthode d'épaississement reposant sur un senseur transporté, capable d'étendre le facteur d'épaississement à l'ensemble du front (i.e. entre $c \approx 0$ et $c \approx 1$), et d'éliminer les problèmes de sous-résolution du front. Le modèle TFM dynamique de Jaravel [48] est conçu pour adresser ce problème.

3.3.3.4 Formulation dynamique de Jaravel

Le modèle TFM dynamique de Jaravel [48], également construit sur l'utilisation d'un senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} , introduit une grandeur ψ permettant d'étendre l'épaississement aux zones de pré-chauffage et post-flamme, englobant ainsi le front dans sa totalité (i.e. entre $c \approx 0$ et $c \approx 1$). L'espèce fictive ψ est transportée, et obéit à l'équation de transport Eq.(3.43) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\psi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\psi) = \nabla \cdot (\rho \mathcal{F} \Xi_{\Delta} \mathcal{D}_{\psi} \nabla \psi) + \frac{\Xi_{\Delta}}{\mathcal{F}} \rho \dot{\omega}_{\psi} \quad (3.43)$$

Le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} prend une forme analogue à celle utilisée dans le modèle TFM dynamique (section 3.3.3.3), mais comporte un paramètre de sensibilité β usuellement fixé à la valeur $\beta = 4.0$. Le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} s'exprime comme Eq.(3.44) :

$$\mathcal{S}_{NF} = \max \left[\min \left(\beta \frac{|\dot{\omega}_k|}{|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}} - 1, 1 \right), 0 \right] \quad (3.44)$$

Le senseur final $\hat{\mathcal{S}}$ conditionne l'épaississement appliqué au front de flamme, et est à la fois fonction de \mathcal{S}_{NF} et d'un "plafonnement" de ψ à 1.0. Le senseur final $\hat{\mathcal{S}}$ s'exprime comme Eq.(3.45) :

$$\hat{\mathcal{S}} = \max \left(\min(\psi, 1), \mathcal{S}_{NF} \right) \quad (3.45)$$

Comme illustré en Fig.3.6, le senseur final $\hat{\mathcal{S}}$ (résultant du transport de ψ) permet un englobement du front de flamme plus large que le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} . Or, l'épaississement est finalement conditionné par le senseur final Eq.(3.45), ce qui permet au facteur d'épaississement d'englober la quasi-totalité du front de flamme (i.e. entre $c \approx 0$ et $c \approx 1.0$) et de palier aux problèmes de sous-résolution.

$$\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{target} - 1) \hat{\mathcal{S}} \quad (3.46)$$

Le terme source de ψ noté $\dot{\omega}_{\psi}$ prend trois expressions, conditionnées par : (i) la valeur de \mathcal{S}_{NF} , (ii) la comparaison entre la température locale et une température seuil T_{switch} .

Dans le front de flamme

Dans la zone de réaction du front de flamme, située à des avancements proches de $c \approx 0.8$, le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} prend la valeur de 1.0, et entraîne de création de ψ . La quantité de ψ créée dans la zone de réaction diffuse en amont/aval de la zone de réaction et permet d'englober l'ensemble du front de flamme. Dans le front, le terme $\dot{\omega}_{\psi}$ prend la valeur $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{flamme}$, et s'exprime comme Eq.(3.47) :

$$\dot{\omega}_{\psi} = \dot{\omega}_{\psi}^+|_{flamme} = \frac{\psi_0 - \psi}{\underbrace{\tau_{num}}_{5\Delta_t}} \implies \text{relaxation vers } \psi_0 \text{ sur une durée } \tau_{num} \quad (3.47)$$

Le paramètre τ_{num} n'a pas de sens physique, et correspond à un temps numérique de relaxation vers ψ_0 . Le paramètre ψ_0 est généralement fixé à la valeur $\psi_0 = 20$, tandis que τ_{num} est imposé à $\tau_{num} = 5\Delta_t$, garantissant une stabilité numérique suffisante. Ce temps court implique l'application du facteur \mathcal{F}_{target} de façon quasi-instantanée, lorsque les conditions de réactivité le permettent (condition $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$).

En amont/aval du front de flamme

Afin de circonscrire le facteur d'épaississement au front de flamme uniquement, et d'éviter que ψ ne diffuse "trop loin" en amont/aval du front de flamme, des termes de destruction de ψ sont introduits. Ces derniers

suffisante de la combustion par une résolution directe de la chimie (vitesses de flamme, délais d'AI corrects...). Toutefois, les récents progrès liés à l'introduction du solveur cinétique SAGE dans CONVERGE rendent désormais atteignable l'utilisation de mécanismes relativement détaillés (du moins d'un point de vue d'applications industrielles) dans des calculs moteurs 3D.

- La sur-diffusivité introduite par le facteur \mathcal{F} pose problème dans le cadre d'un allumage par bougie. Ainsi, l'énergie déposée doit être sensiblement supérieure aux valeurs réelles rencontrées dans un moteur, pour éviter une extinction de flamme due à la diffusion trop rapide du dépôt d'énergie. Également, l'utilisation de TFM pour des phénomènes d'AI peut engendrer une forte surestimation des délais, de par le facteur \mathcal{F} appliqué aux taux de réaction. Cet aspect du modèle TFM limite a priori son utilisation en configurations Dual-Fuel.
- En raison d'effets de sur-diffusivité, les flux pariétaux peuvent aussi être sur-estimés, et les effets de mélange amplifiés, affectant alors la combustion d'un mélange hétérogène.

3.4 Modèles d'auto-inflammation

Diverses approches de modélisation de l'AI ont été développées. Un des premiers modèles en date est le modèle de Shell proposé en 1977 par Halstead et al. [41], et repose sur une modélisation mathématiques de l'AI. Toutefois, ce modèle étant trop archaïque pour une utilisation en calcul RANS/LES moteur, d'autres approches de modélisation ont été développées. Celles-ci reposent sur une résolution directe ou bien un tabulation de la chimie. Certaines approches prennent en compte l'influence des gradients (d'avancement, mélange) à une échelle inférieure à la taille de maille Δ_x . Il s'agit alors de modèles à chimie hétérogène. Dans le cas contraire, il s'agit de modèles de chimie homogène considérant que la composition du mélange est homogène à l'échelle de la cellule. Quelques exemples sont décrits dans la suite.

3.4.1 Approches à chimie homogène

3.4.1.1 TKI

L'approche TKI (Tabulated Kinetics of Ignition) est proposée par Colin et al. [27] et utilisée avec succès en configuration RANS Diesel et HCCI, de même qu'en configuration RANS CAI (Controlled Auto-Ignition) [54]. TKI repose sur la tabulation de termes sources d'avancement, issue de calculs de réacteurs homogènes isobares. Les valeurs $\dot{\omega}_c$ sont stockées pour un ensemble de valeurs discrètes de d'avancement, richesse, température, pression, taux d'EGR... La tabulation des termes sources sur des réacteurs 0D, peu coûteuse en temps CPU, permet la génération de tables de grandes dimensions couvrant l'ensemble des conditions thermodynamiques rencontrées en simulation moteur 3D, ce qui lui vaut aujourd'hui d'être largement utilisée dans l'industrie. Souvent couplé avec ECFM (section 3.4.3), TKI partage le même mode de calcul des états gaz GF/GB. Le terme source d'une espèce k s'exprime alors comme Eq.(3.52) :

$$\dot{\omega}_k = \rho_u Y_k^u \dot{\omega}_c^{TKI}(c, T^u, P, \phi, \chi_{EGR} \dots) \quad (3.52)$$

3.4.1.2 FPI

Le modèle FPI (Flame Prolongation of ILDM) est initialement développé pour des flammes de pré-mélange et de diffusion par Maas et al. [65], puis étendu à des phénomènes d'AI par Domingo et al. [31] dans un contexte LES, pour proposer une description du chemin réactionnel via une tabulation d'espèces majoritaires. Une adaptation de cette approche à été utilisée avec succès en configuration RANS Diesel par Pera et al. [84]. Cette approche repose sur la tabulation des termes sources d'avancement $\dot{\omega}_c$ (tout comme TKI), mais aussi des fractions massiques d'espèces majoritaires, à partir de calculs 0D à pression constante réalisés à partir d'un schéma détaillé. Ainsi, à chaque valeur de c est associée une valeur $\dot{\omega}_c(c)$, et une valeur $Y_i(c)$ pour l'espèce majoritaire i du système. In fine,

les termes sources des espèces sont déduits par bijection entre l'avancement et les conditions thermodynamiques.

$$\dot{\omega}_k = \frac{Y_k^{0D}(c(t + \Delta_t)) - Y_k(t)}{\Delta_t} \quad (3.53)$$

3.4.1.3 SAGE

L'approche SAGE repose sur une résolution directe de la chimie, et ne comprend aucune modélisation des hétérogénéités de sous-maille. L'approche SAGE, présente dans CONVERGE [95], consiste en réalité en une approche no-model. Historiquement très coûteuse en temps CPU, notamment en raison du nombre important d'espèces/réactions à considérer pour une description fine des phénomènes complexes rencontrés en applications moteurs, cette stratégie est rendue industriellement viable grâce à l'intégration d'un solveur cinétique dédié, et parallélisé indépendamment de l'écoulement. Cela permet la résolution efficiente de la chimie et une diminution drastique des temps de calcul. Ce type d'approche a été utilisé avec succès dans des configurations LES type Spray A [35, 50, 118]. Les auteurs attribuent toutefois la prédictivité de ce type d'approche à la résolution fine employée.

3.4.2 Approches à chimie hétérogène

3.4.2.1 CMC

Afin de prendre en compte des effets de chimie complexe et de combustion stratifiée sensibles aux effets de micro-mélange et de dissipation scalaire, l'approche CMC (Conditional Moment Closure) a été proposée par Klimenko [53] et notamment utilisée dans des configurations RANS Dual-Fuel [112] (conjointement avec un modèle à G-equation), et LES en configuration HCCI [100]. Cette approche repose sur le transport des fractions massiques moyennes conditionnées à des valeurs de fraction de mélange discrètes ($\overline{Y_k|Z^*}$). Les fractions massiques sont ensuite obtenues par intégration d'une PDF de la fraction de mélange $P(Z^*)$ et s'exprimant comme Eq.(3.54) :

$$\bar{\rho}\tilde{Y}_k = \int_0^1 \overline{Y_k|Z^*} P(Z^*) dZ^* \quad (3.54)$$

Le nombre d'équations de transport à résoudre pour un système contenant N_{esp} espèces, et N_Z points discrétisation du mélange, s'élève alors à $N_{esp} \times N_Z$, valeur prohibitive dans le cadre d'applications industrielles.

3.4.2.2 RIF

L'approche RIF (Representative Interactive Flamelets) introduite par Pitsch et al. [88] assimile chaque élément de surface de flamme à une flammelette instationnaire étirée 1D, obéissant à l'équation Eq.(3.55) introduite par Peters [85], et appliquée aux N_{esp} espèces du système. Les quantités relatives à l'écoulement (pression, température, richesse, enthalpie, taux de dissipation scalaire...) sont transmises par le code CFD à un solveur de flammelettes 1D assurant la résolution du front de flamme dans l'espace des fractions de mélange Z . L'approche RIF est essentiellement utilisée dans un contexte RANS, notamment en configuration jet Diesel [34]. En effet, les calculs de flammelettes ayant un cout CPU élevé (a fortiori avec un mécanisme cinétique lourd), ce type d'approche est difficilement industrialisable en LES, bien qu'utilisé par Davidovic [29] sur une configuration de type jet Diesel (spray A).

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k \quad (3.55)$$

$$\text{avec } \chi = \mathcal{D}_k |\nabla Z|^2 \quad (3.56)$$

3.4.2.3 ADF

Afin de réduire le temps de calcul lié résolution de la chimie, une tabulation des taux de réactions des espèces à partir de calculs de flammelettes instationnaires 1D est proposée par Ihme et al. [45] dans le modèle UFPV (Unsteady Flamelet Progress Variable). La génération de tables à partir de flammelettes instationnaires 1D peut cependant avoir un coût CPU prohibitif. Afin d'adresser ce problème, le modèle ADF (Approximated Diffusion

Flame) est proposé par Michel et al. [72]. Un terme source d'avancement $\dot{\omega}_{Y_c}^{0D}$ est tabulé sur des réacteurs homogènes utilisant une chimie complexe largement utilisable dans le cadre de calculs 0D. Puis, une équation de flammelette approximée 1D mono-espèce basée sur l'avancement Eq.(3.57) est résolue, et permet la tabulation des taux de réactions associés à chaque flammelette approximée. Cela permet la prise en compte des hétérogénéités de mélange et des effets de dissipation scalaire, tout en réduisant le système de N_{esp} espèces à un système à une espèce unique, diminuant alors drastiquement le coût CPU associé à la tabulation.

$$\frac{\partial Y_c^{ADF}}{\partial t} = \dot{\omega}_{Y_c}^{0D}(Z, c) + \chi(Z, a) \frac{\partial^2 Y_c}{\partial Z^2} \quad (3.57)$$

Afin de représenter les hétérogénéités de sous maille, une PDF de fraction de mélange est introduite et constitue le modèle ADF-PCM (ADF-Presumed Conditional Moment). L'approche ADF-PCM a été utilisée avec succès dans des configurations de jet turbulent RANS air/méthane [71] et moteur Diesel 3D [70]. Toutefois, les coûts CPU, ainsi que les tailles de tables associées à l'approche ADF demeurent élevés, et rendent son industrialisation difficilement réalisable, a fortiori dans des configurations Dual-Fuel faisant intervenir deux fractions de mélange.

3.4.3 Couplage TKI-ECFM

Le couplage TKI-ECFM vise à représenter les deux modes de combustion étudiés dans ce travail : l'AI représentée par TKI, et la déflagration représentée par ECFM. Cette approche a notamment été utilisée pour l'étude du cliquetis en conditions LES moteur [56, 58, 97] et les modèles TKI et ECFM ont bénéficié de différentes méthodes de couplages. Seule la dernière méthode développée dans le cadre des travaux de Robert [97] et actuellement utilisée, est présentée ici.

3.4.3.1 Découplage des variables d'avancement

L'avancement de réaction global est décrit à partir de la masse de carburant consommée, par rapport à celle disponible dans les gaz frais. Pour plus de clarté, la décomposition bimodale gaz frais/brûlés est rappelée ici Eq.(3.58) :

$$\tilde{X} = (1 - \tilde{c})\tilde{X}^u + \tilde{c}\tilde{X}^b \quad (3.58)$$

Un avancement propre à chaque mode de combustion est alors introduit par une description bimodale comprenant une composante liée à l'AI (\tilde{c}_{AI}), et à la propagation de flamme (\tilde{c}_{Σ}). Ainsi, pour une quantité filtrée quelconque \tilde{X} , la ségrégation AI/déflagration implique :

$$\tilde{X} = (1 - \tilde{c}_{\Sigma})\tilde{X}^{AI} + \tilde{c}_{\Sigma}\tilde{X}^b \quad (3.59)$$

La quantité \tilde{X}^{AI} indique la quantité non-consommée par le front de flamme, et disponible pour une combustion par AI. Ces gaz frais peuvent par conséquent être décomposés en une partie brûlée par AI, et une partie non brûlée, ni par AI ni par propagation de flamme.

$$\tilde{X}^{AI} = (1 - \tilde{c}_{AI})\tilde{X}^u + \tilde{c}_{AI}\tilde{X}^b \quad (3.60)$$

En posant $\tilde{X} = \tilde{c}$, avec $\tilde{X}^u = \tilde{c}^u = 0$ et $\tilde{X}^b = \tilde{c}^b = 1$, et en combinant Eq.(3.59) et Eq.(3.60), on obtient une relation Eq.(3.61) entre l'avancement global \tilde{c} , et les avancements relatifs à l'AI et à la propagation de flamme respectivement \tilde{c}_{AI} et \tilde{c}_{Σ} .

$$1 - \tilde{c} = (1 - \tilde{c}_{AI})(1 - \tilde{c}_{\Sigma}) \quad (3.61)$$

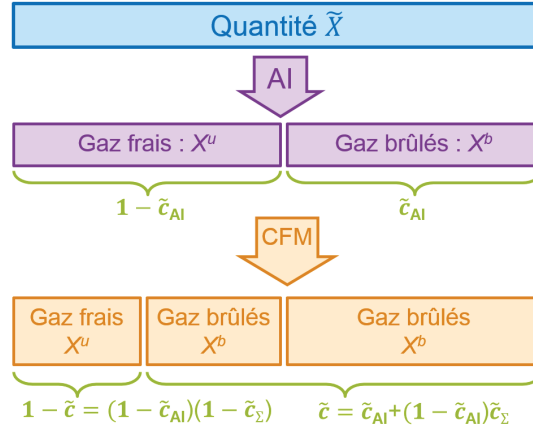


FIGURE 3.7 – Représentation du découplage des variables d’avancement liées à l’AI et à la propagation de flamme, ainsi que de la description bimodale GF/GB. Repris de Belaid [11].

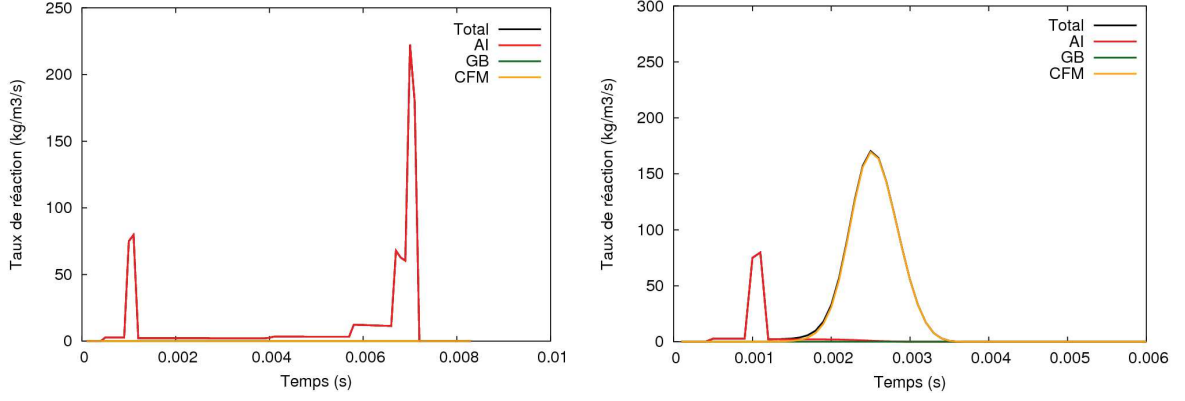
3.4.3.2 Application à des configurations *Dual-Fuel*

Le couplage TKI-ECFM possède a priori des propriétés nécessaires à la prise en compte de la combustion Dual-Fuel. En effet, sa description de l’AI permise par la tabulation d’une chimie complexe (TKI), ainsi que sa description de l’interaction flamme/turbulence (ECFM) validée dans des cas moteurs, en font un candidat potentiel à la simulation de la combustion Dual-Fuel. Cependant, les travaux de Belaid [11] ont mis en défaut la prédictivité de ce couplage dans certaines configurations académiques, et moteur 3D. Ainsi, ces travaux ont porté sur l’étude des différents régimes de combustion en configurations Dual-Fuel, au sein d’un moteur PSA DW10 modifié spécifiquement pour fonctionner en conditions Dual-Fuel (charge pré-mélangée air/iso-octane et air/méthane, allumée par l’injection d’un spray pilote Diesel). Des campagnes de mesures expérimentales ont permis la comparaison avec des données numériques issues de simulations RANS (code de calcul IFP-C3D) sur plusieurs points de fonctionnement. Ces comparaisons ont montré une divergence significative entre les données expérimentales et numériques, mettant en évidence les limites du couplage TKI-ECFM. Différents tests visant à comprendre l’origine de ces écarts à l’expérience ont été effectués, et succinctement résumés ci-après.

Critère de dépôt de surface de flamme

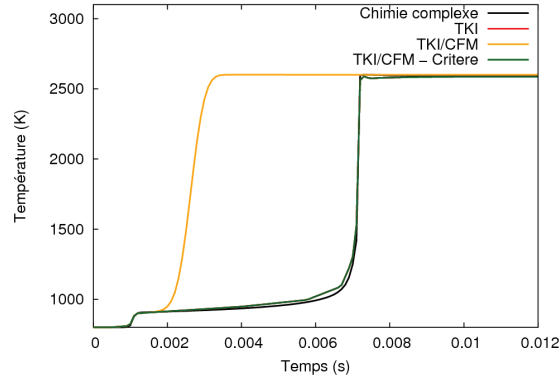
Des calculs RANS ont été effectués sur un domaine 2D homogène en réactivité. Dans cette configuration, un calcul utilisant le couplage TKI-ECFM est comparé à un calcul utilisant uniquement TKI, et à un calcul utilisant une chimie détaillée, alors considéré comme référence. Cela mis en évidence la nécessité d’un critère de transition conditionnant le dépôt de surface de flamme.

Le calcul TKI (i.e. sans ECFM) Fig.3.8a montre une évolution du dégagement de chaleur marquée par deux pics, le premier représentant l’AI de flamme froide (LTC), le second l’AI de flamme chaude (HTC). Le calcul TKI-ECFM (sans critère de dépôt de surface de flamme) Fig.3.8b, montre premièrement un pic de dégagement de chaleur par AI analogue au calcul TKI, puis un fort dégagement de chaleur subséquent à l’AI de flamme froide, provenant du modèle ECFM3Z. Ce dernier est antérieur à l’AI de flamme chaude, et témoigne alors d’un dépôt de surface de flamme non-physique, puisqu’il survient avant l’allumage du mélange. Bien que le domaine soit homogène en réactivité, l’apparition de gradients d’avancement purement numériques génère un dépôt de surface de flamme précoce (car $\bar{\Sigma} = |\nabla c|$), survenant avant l’AI de flamme chaude (HTC). Afin de supprimer cet effet de propagation de flamme non-physique, des critères de dépôt de surface de flamme ont été testés. Ceux-ci portent notamment sur un avancement minimal de réaction tel que $\tilde{c}_{AI} > c_{min}$, ou sur la comparaison des vitesses de flamme laminaire S_L et d’auto-inflammation $S_{AI} = 1/|\nabla \tau_{AI}|$. Ces ajouts ont permis une amélioration notable de la prédictivité du couplage TKI-ECFM sur la configuration étudiée Fig.3.8c, puisque le calcul TKI-ECFM avec critère (courbe rouge confondue avec la courbe verte) suit la même tendance que le calcul de référence à chimie résolue.



(a) Modèle TKI seul. Évolution temporelle des différents termes sources.

(b) Couplage TKI-ECFM. Évolution temporelle des différents termes sources. Le comportement du couplage TKI-ECFM prédit une AI antérieure au calcul TKI seul Fig.3.8a.



(c) Comparaison en température moyenne des calculs à chimie résolue (référence), TKI, TKI-ECFM sans critère, et TKI-ECFM avec un critère de dépôt de surface de flamme basé sur la comparaison des vitesses d'AI et de flamme pré-mélangée tel que $S_{AI} < S_L$.

FIGURE 3.8 – Résultats issus du couplage TKI-ECFM avec découplage des variables d'avancement sur un domaine 2D turbulent, et homogène en réactivité. L'ajout d'un critère de transition, ici $S_{AI} < S_L$ Fig.3.8c, permet de reproduire le comportement du calcul de référence et empêche un dépôt de surface de flamme non-physique subséquent à l'AI de flamme froide (LTC) Fig.3.8b. Repris de Belaid [11].

Dépôt de surface de flamme à l'allumage

Le plissement à l'équilibre Ξ_{eq} est un ingrédient utilisé lors du dépôt de surface de flamme, aux premiers instants de l'allumage Eq.(3.62). Il représente l'influence de la turbulence sur la surface de flamme créée au niveau du noyau d'allumage. Il a été employé dans les travaux de Belaid [11] sur des calculs moteurs RANS 3D, afin d'évaluer le rôle de la quantité de surface de flamme déposée sur la transition AI→déflagration, et est décrit plus en détail dans [75]. Cet unique ajout n'a pas permis une amélioration significative des résultats.

Néanmoins, un paramètre empirique ci_{eq} permettant une variation "manuelle" du dépôt de surface de flamme Eq.(3.63), a permis de retrouver des résultats semblables à l'expérience. Cependant, le paramètre ci_{eq} étant cas-dépendant, ne fournit pas un modèle de dépôt de flamme universel assurant la prédictivité du couplage TKI-ECFM sur un point de fonctionnement quelconque.

$$\Xi_{eq} = 1 + \frac{2}{S_L} \sqrt{\kappa \tau_t \frac{k^2}{\epsilon}} \quad (3.62)$$

avec κ , τ_t , k , et ϵ respectivement un terme de production de flamme par étirement turbulent, le temps intégral turbulent, l'énergie cinétique turbulente, le taux de dissipation turbulent.

$$\bar{\Sigma} = ci_{eq} \Xi_{eq} |\nabla \bar{c}| \quad (3.63)$$

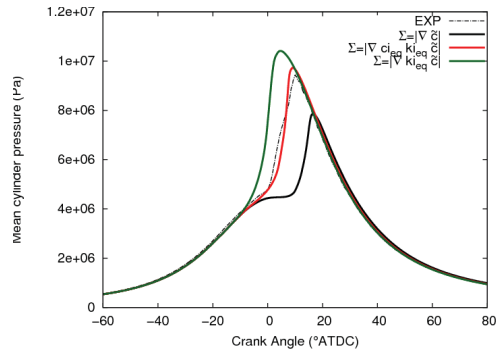


FIGURE 3.9 – Évolution de la pression cylindre moyenne en fonction de l'angle vilebrequin. Courbe noire : $\bar{\Sigma} = |\nabla \tilde{c}|$; Courbe rouge : $\bar{\Sigma} = c_{i_{eq}} \Xi_{eq} |\nabla \tilde{c}|$; Courbe verte : $\bar{\Sigma} = \Xi_{eq} |\nabla \tilde{c}|$; Ligne discontinue : Courbe expérimentale. Repris de Belais *et al.* [75].

3.5 Conclusions du chapitre

Les modèles de combustion numérique présentés dans ce chapitre, conçus pour des technologies "conventionnelles" essence ou Diesel, possèdent des propriétés permettant potentiellement leur utilisation dans des conditions Dual-Fuel, car capables de reproduire séparément les phénomènes d'AI, et de déflagration. Ainsi, le régime de propagation de flamme turbulente (partiellement) pré-mélangée peut être traité par des approches de type ECFM, G-equation, TFM. Le régime d'AI peut quant à lui être représenté par des approches à chimie homogène telles que TKI, FPI, SAGE moyennant une hypothèse de gradients résolus à l'échelle de la cellule, ou à chimie hétérogène telles que CMC, RIF, ADF, moyennant une modélisation des hétérogénéités de sous-maille. Toutefois, l'interaction entre différents régimes, et plus particulièrement la transition AI→déflagration reste une problématique de taille, car aucune approche de modélisation de ce phénomène n'a permis à ce jour une utilisation prédictive et industrialisable (coût CPU acceptable) en configurations moteur Dual-Fuel.

L'approche TKI-ECFM développée à IFPEN génère des temps de calcul largement accessibles pour des applications industrielles, mais les travaux de Belaid [11] ont montré son manque de prédictivité en configuration moteur Dual-Fuel, tout du moins dans un contexte RANS. Toutefois, des tests ont montré que la prédictivité du couplage TKI-ECFM pouvait être largement améliorée au moyen d'un critère de transition AI→déflagration, et d'un dépôt de surface de flamme adapté. Cela suggère alors deux choses : (i) la prédictivité du couplage TKI-ECFM dans un contexte LES relatif à ce travail de thèse doit être évaluée, (ii) un modèle de couplage adapté entre TKI et ECFM posséderait a priori des caractéristiques permettant une utilisation industrialisable universelle en configurations LES moteur Dual-Fuel. Le couplage TKI-ECFM constitue donc une approche de modélisation privilégiée pour la suite de ce travail.

Également, une approche reposant sur SAGE (approche no-model) pour représenter le régime l'AI, et sur un modèle TFM (flamme épaissie) pour représenter le régime de déflagration permettrait a priori de représenter des phénomènes de transition AI→déflagration. Cependant, ce type d'approche n'a pour le moment jamais été explorée en configuration moteur Dual-Fuel. L'approche SAGE/TFM (ou plutôt no-model/TFM) constitue donc une seconde approche de modélisation privilégiée pour la suite de ce travail.

Toutefois, les deux approches de modélisation envisagées pour la suite de ce travail (TKI-ECFM et no-model/TFM) nécessitent une compréhension approfondie de la transition AI→déflagration, permettant le développement d'un ou plusieurs critère(s) d'identification a priori du régime de combustion dominant, de façon à adapter la réponse du modèle au régime rencontré. Cet aspect est traité au chapitre suivant à travers une étude fondamentale de la transition AI→déflagration.

Transition AI → déflagration, étude fondamentale

Ce chapitre est dédié à une analyse fondamentale de la transition AI→déflagration. Ce phénomène est étudié par l'intermédiaire de calculs 1D stratifiés en réactivité, permettant d'initier un front de réaction pré-mélangé à partir d'un noyau d'AI, et donc de reproduire la typologie d'allumage caractéristique du moteur Dual-Fuel. Une configuration 1D est choisie car sa simplicité permet des variations paramétriques (température, pression, étendue du gradient de réactivité) à faible coût de calcul. Ainsi, l'étude est focalisée sur un élément de surface de flamme plane. Tout d'abord, une étude mono-carburant CH_4 à pression $P = 1\text{bar}$, est effectuée sur le solveur DNS/LES AVBP [106], et permet le développement d'une méthodologie d'identification du régime de combustion dominant, basée sur des outils discutés au chapitre 3. Cette méthodologie est ensuite testée dans des configurations 1D Dual-Fuel n-dodécane/ CH_4 à $P = 15\text{bar}$ et $P = 60\text{bar}$ se rapprochant de conditions typiques-moteur, et sur le solveur industriel RANS/LES CONVERGE [95]. La proximité des tendances relevées en configurations mono/bi-carburant montre une certaine robustesse et généralité de la méthodologie développée.

4.1 Étude préliminaire mono-carburant

Cette section est dédiée à la présentation des résultats issus de l'étude simplifiée 1D mono-carburant réalisée avec AVBP. La robustesse et la précision des schémas numériques ainsi que la présence d'outils de post-traitement (notamment ASAP) facilitant l'analyse des données, ont justifié l'orientation vers le code AVBP pour le commencement des travaux.

4.1.1 Hypothèses simplificatrices

La dispersion du spray pilote (carburant Diesel) au sein d'une chambre pré-mélangée homogène air/ CH_4 engendre de fortes hétérogénéités en composition et en température, via des phénomènes d'évaporation. Les conditions moteurs Dual-Fuel mettent donc en jeu des gradients de réactivité se présentant sous deux dimensions, composition/température, et couvrent donc un large spectre de conditions thermodynamiques. Néanmoins, il a été dans un premier temps choisi de réduire les gradients de réactivité à la seule dimension température, et de considérer une composition homogène air/ CH_4 , simplifiant significativement la mise en place des calculs, et leur post-traitement/analyse. Également, une pression $P = 1.0\text{bar}$ induisant des épaisseurs de flamme relativement fortes ($\delta_L \approx 100\mu\text{m}$) a été sélectionnée. Cela permet notamment de relâcher la contrainte sur le maillage vis-à-vis de la résolution spatiale du front de réaction, et donc de faciliter la multiplication des cas tests. En outre, des conditions aux limites permettant de maintenir une pression constante durant le calcul sont sélectionnées. En effet, l'AI d'un noyau "isolé" dans une chambre de combustion s'opère sur des durées de l'ordre de 0.1 – 1.0ms, courtes devant un cycle de détente de l'ordre de 10ms. De fait, bien qu'un cycle moteur soit fortement non-isobare, l'AI

d'une poche de gaz "isolée" est considérée suffisamment courte devant un cycle de détente pour approximer son déroulement comme un processus isobare. Ces simplifications s'éloignent considérablement de conditions typiques-moteur, mais mettent toutefois en jeu la propagation d'un front de réaction initié par AI au sein d'un mélange stratifié en réactivité, caractéristique principale dont cette étude est l'objet.

4.1.2 Code de calcul

Les cas mono-carburants exposés dans cette section ont été réalisés avec AVBP, solveur compressible permettant la résolution des équations de l'aérothermochimie, sur des maillages structurés ou non-structurés. Ce dernier utilise une méthode de volumes finis Cell-Vertex, consistant à appliquer les équations de conservation à la cellule et à stocker la solution aux noeuds. La progression temporelle repose sur l'utilisation d'un schéma explicite de Runge-Kutta tandis que les schémas diffusifs et convectifs utilisés ici sont respectivement FE_2Δ (éléments finis d'ordre 2 en espace) et Lax-Wendroff (volumes finis d'ordre 2 en espace et en temps). Ces schémas génèrent des temps de calcul relativement faibles justifiant leur usage.

4.1.3 Maillage

L'ensemble des calculs de cette section implique un domaine 1D dont une représentation est proposée en Fig.4.1. Un maillage $\Delta_x = 10\mu\text{m}$ permet la résolution spatiale sur 10 à 40 points du front de réaction, dont l'épaisseur varie typiquement entre $\delta_L = 100\mu\text{m}$ et $\delta_L = 400\mu\text{m}$ selon les conditions thermodynamiques locales. Aux extrémités latérales du domaine sont appliquées des conditions limites de glissement adiabatique (WALL_SLIP_ADIAB), et de sortie à pression fixée (OUTLET_RELAX_P), permettant de maintenir une pression constante dans le domaine (excepté d'éventuelles ondes de pression). Aux bords longitudinaux sont appliquées des conditions symétriques, empêchant tout effet de bord interférant avec l'étude (adhérence aux parois, flux thermiques...).

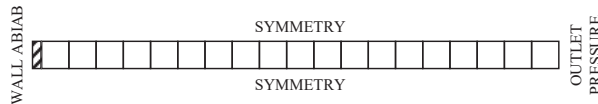


FIGURE 4.1 – Représentation du maillage régulier 1D et des conditions limites appliquées.

4.1.4 Conditions initiales

Un gradient de température est imposé en condition initiale, et permet la propagation d'un front de réaction initié par AI dans un milieu stratifié en réactivité. Les températures minimales et maximales " T_{min} " et " T_{max} ", ainsi que l'étendue de la stratification " L_{spot} ", ont été variées Fig.4.2 afin d'identifier les phénomènes inhérents à la transition AI→déflagration. Ce gradient thermique vise à imiter de façon simplifiée les hétérogénéités de réactivité rencontrées au voisinage d'un spray pilote en conditions Dual-Fuel. La composition du mélange stœchiométrique air/ CH_4 est homogène et dans tous les cas mono-carburant. La composition devant à la fois permettre l'AI, ainsi que la propagation d'une flamme pré-mélangée, une richesse comprise dans la zone d'inflammabilité du méthane est donc sélectionnée. À noter cependant que le choix d'un mélange stœchiométrique est arbitraire.

Les délais d'AI du mélange varient de façon monotone et inversement proportionnelle à sa température initiale Fig.4.3. Le gradient thermique imposé engendre de facto un auto-allumage autour du point le plus chaud T_{max} (à gauche du domaine) Fig.4.2, suivi d'une propagation du front de réaction vers les zones plus froides (vers la droite du domaine). Le front de réaction propage donc de la zone la plus réactive vers la moins réactive.

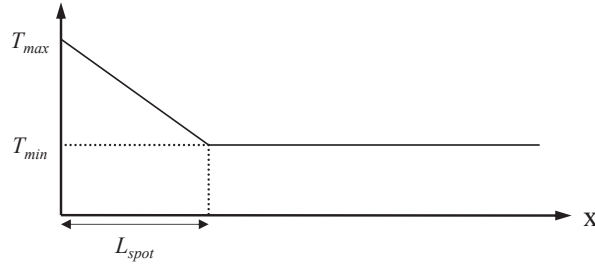


FIGURE 4.2 – Représentation du champ de température initial imposé dans le domaine d'étude 1D mono-carburant. La température varie de T_{max} à T_{min} sur une distance L_{spot} .

4.1.5 Schéma réactionnel

Deux schémas réactionnels représentant la combustion du méthane, ont été utilisés. Par simplicité, un schéma simplifié à 2 étapes (2S) et 6 espèces a dans un premier temps été utilisé, et a permis d'identifier certaines tendances qui ont été confirmées par l'utilisation d'un schéma ARC (Analytically Reduced Chemistry), 19 espèces, 184 réactions, 11 QSS (Quasi Steady State). Ce schéma ARC est dérivé par Lu et al. [61] du schéma détaillé GRI3.0 [111], ce dernier étant souvent pris comme référence pour la combustion du méthane. Une comparaison des schémas ARC et GRI3.0 [111] en termes de délais d'AI et de vitesses de flamme laminaire est présentée Fig.4.3, afin de vérifier la représentativité du schéma ARC dans les conditions thermodynamiques de l'étude. Les tendances relevées avec les schémas 2S et ARC étant semblables, seuls les résultats issus des calculs ARC sont présentés afin d'éviter toute redondance.

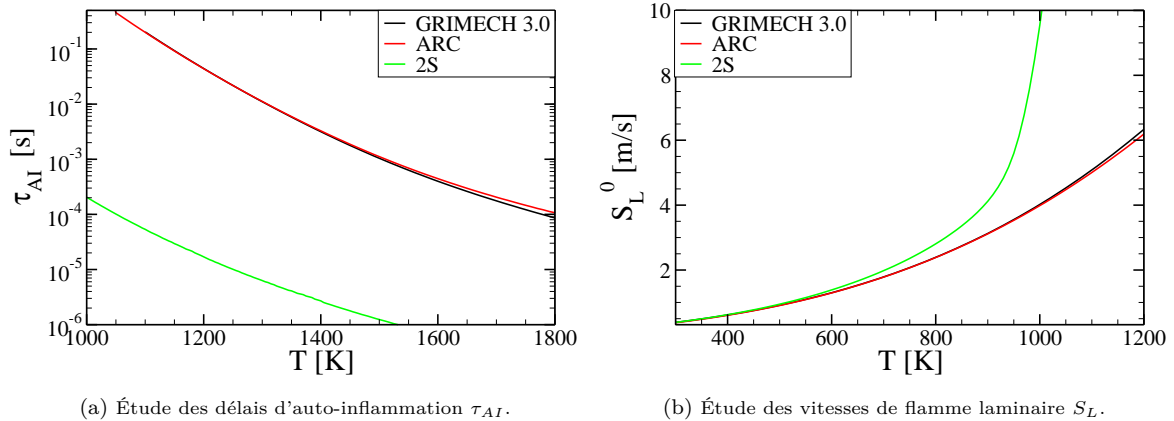


FIGURE 4.3 – Évolution des délais d'AI τ_{AI} et des vitesses de flamme laminaire S_L en fonction de la température pour les schémas 2S, ARC [61] et GRI3.0 [111], à richesse $\phi = 1.0$ et pression constante $P = 1.0\text{bar}$. Ces conditions sont représentatives des conditions de l'étude mono-carburant. Calculs réalisés par Cantera [38] en réacteur homogène (gauche) et flamme laminaire 1D non-étirée (droite).

4.1.6 Méthodologie de post-traitement

Afin de discerner la propagation d'un front d'AI de celle d'une flamme pré-mélangée, une méthodologie de post-traitement particulière est développée. Cette méthodologie s'appuie notamment sur l'étude de la vitesse de déplacement S_d , et la comparaison des phénomènes réactifs et diffusifs, comme régulièrement proposé dans la littérature (section 2.3). Toutefois, l'épaisseur du front de réaction est également étudiée dans cette étude. À la connaissance de l'auteur, cette grandeur n'a jamais été étudiée dans le cadre d'analyses de la transition AI→déflagration.

4.1.6.1 Bilan diffusion/réaction

Le bilan diffusion/réaction est basé sur les termes de réaction et de diffusion de l'équation de transport du carburant, intégrés sur tout le domaine. Les termes de diffusion et de réaction s'expriment respectivement comme Eq.(4.1) et Eq.(4.2) :

$$\text{Diff} = \int \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{D}_{CH_4} \frac{\mathcal{W}_{CH_4}}{\mathcal{W}} \frac{\partial X_{CH_4}}{\partial x_i} \right) \right] dv \quad (4.1)$$

$$\text{Reac} = \int \dot{\omega}_{CH_4} dv \quad (4.2)$$

4.1.6.2 Vitesse de consommation

La vitesse de consommation du front de réaction $\dot{\omega}_{reac}$ correspond au terme de réaction Eq.(4.2) intégré sur tout le domaine, mais conditionné entre $c_{min} = 0.03$ et $c_{max} = 0.97$ de façon à isoler le front de réaction des régions amont/aval à celui-ci. Cette valeur est notamment comparée à celle d'un front de flamme pré-mélangée laminaire 1D canonique (Cantera [38]) notée $\dot{\omega}_L$. Celle-ci s'exprime comme Eq.(4.3) :

$$\dot{\omega}_{reac} = \int \dot{\omega}_{CH_4} dv \Big|_{c_{min} < c < c_{max}} \quad (4.3)$$

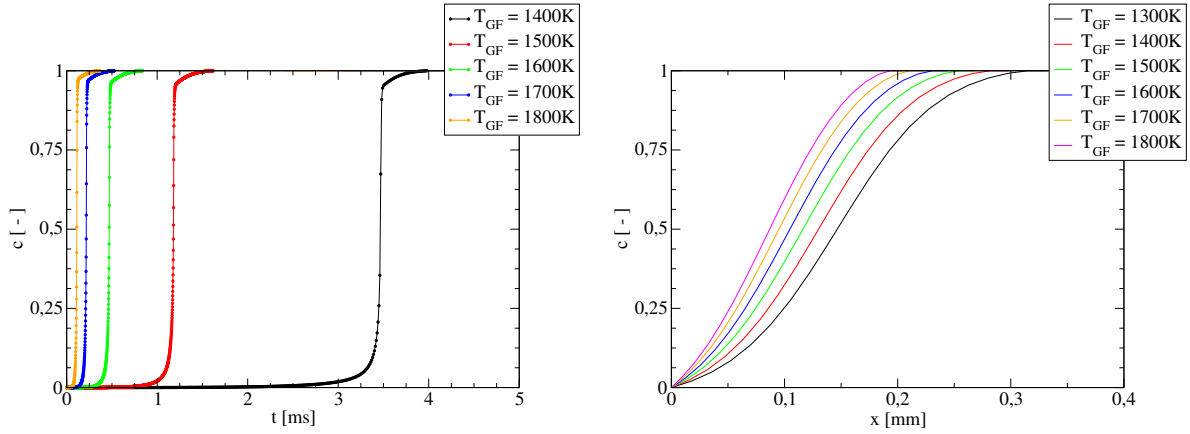
4.1.6.3 Variable de progrès

Diverses définitions de la variable de progrès, notamment basées sur la température ou les fractions massiques d'espèces dominantes (carburant, oxydant, température) sont usuellement employées dans la littérature. Toutefois, ces définitions sont applicables uniquement lorsque la composition ou la température du mélange à l'état GF est unique. Ainsi, les stratifications thermiques imposées à l'état initial ne permettent pas de calculer l'avancement de réaction à partir de la température. De même, la composition à l'état GB varie significativement avec la température GF. L'utilisation d'une espèce unique comme CO_2 ou O_2 , n'est donc pas envisageable Fig.4.4c. Une définition construite sur la fraction massique de carburant présenterait l'avantage d'être indépendante de la stratification thermique, puisque la fraction de CH_4 est constante côté GF et nulle côté GB. Cependant, dans certaines conditions thermodynamiques, le carburant peut être consommé très rapidement par craquage thermique, menant à des avancements de l'ordre de $c \approx 1.0$, sans pour autant que le mélange n'ait atteint un état GB, ce qui mène à une incohérence.

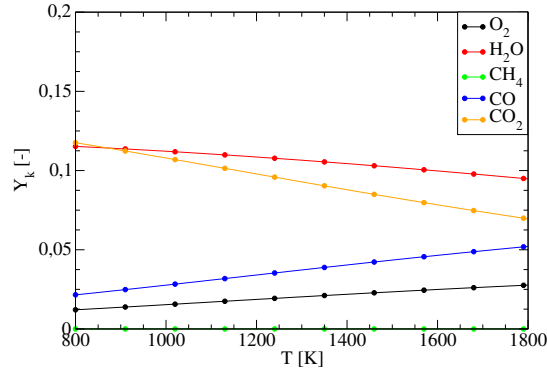
Finalement, une définition basée sur CO et CO_2 est choisie. En effet, dans les conditions présentes, la fraction massique de carbone se comporte comme un scalaire passif puisque le carbone présent dans le carburant CH_4 est retrouvée dans les produits carbonés CO et CO_2 . À noter que d'autres produits carbonés sont présents dans les GB, mais leur concentration est considérée négligeable. Un bilan massique construit sur les trois espèces CO , CO_2 , CH_4 , et indépendant de la stratification initiale est donc utilisé, et la définition de l'avancement est s'exprime comme Eq.(4.4) :

$$c = \frac{\frac{n_{C,CO} \mathcal{W}_C}{\mathcal{W}_{CO}} Y_{CO} + \frac{n_{C,CO_2} \mathcal{W}_C}{\mathcal{W}_{CO_2}} Y_{CO_2}}{\frac{n_{C,CH_4} \mathcal{W}_C}{\mathcal{W}_{CH_4}} Y_{CH_4}^{GF}} \quad (4.4)$$

avec $n_{C,k}$, \mathcal{W}_k respectivement le nombre d'atomes de carbone, et la masse moléculaire de l'espèce k . En outre, la bijectivité de l'avancement avec le temps et l'espace est vérifiée sur un réacteur 0D et une flamme 1D sur des points thermodynamiques représentatifs des conditions de l'étude Fig.4.4a et 4.4b.



(a) Évolution temporelle de l'avancement sur un réacteur 0D à pression constante (Cantera [38]). (b) Évolution spatiale de l'avancement pour une flamme pré-mélangée 1D (Cantera [38]).



(c) Évolution des principales espèces présentes à l'état d'équilibre, en fonction de la température initiale (Cantera [38]).

FIGURE 4.4 – Étude du comportement de la variable d'avancement Eq.(4.4), et de la composition d'équilibre, pour un mélange stœchiométrique air/ CH_4 , à pression $P = 1\text{bar}$ et $\phi = 1.0$. L'avancement est bijectif en temps et en espace. La composition GB varie avec la température GF.

4.1.6.4 Vitesse de déplacement

La vitesse de déplacement S_d traduit la vitesse relative du front réactif dans le référentiel de l'écoulement Fig.4.5. L'expansion thermique accompagnant la combustion induit une accélération des gaz traversés par le front de réaction (conservation de la masse). La vitesse de déplacement S_d est alors locale, et c -dépendante. Par conséquent, la vitesse de déplacement à un avancement donné $S_d(c)$ est liée à sa valeur à l'état gaz frais S_d^{GF} par la relation Eq.(4.5).

$$S_d(c) = \frac{\rho^{GF}}{\rho(c)} S_d^{GF} \quad (4.5)$$

Dans ce cadre d'une flamme pré-mélangée, la vitesse de flamme laminaire S_L équivaut à la vitesse de déplacement évaluée côté GF S_d^{GF} . La définition générale de S_d repose en outre sur la dérivée partielle de la variable de progrès Eq.(4.6) et peut être formulée comme Eq.(4.7) avec un avancement c calculé à partir d'une espèce [123], ou bien comme Eq.(4.8) lorsque l'avancement est calculé à partir de la température [89].

$$S_d = \frac{1}{|\nabla c|} \frac{Dc}{Dt} \quad (4.6)$$

$$S_d = \frac{1}{\rho} \left[\frac{\nabla \cdot \left(\rho \mathcal{D}_c \frac{W_c}{W} \nabla X_c \right) + \dot{\omega}_{Y_c}}{|\nabla c|} \right] \quad (4.7)$$

$$S_d = \frac{1}{|\nabla T|} \left[\dot{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho C_p \mathcal{D}_T \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial T}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N C_{p,k} Y_k \mathcal{D}_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) \right] \quad (4.8)$$

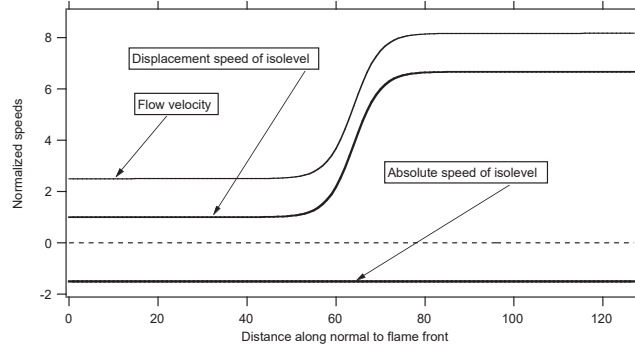


FIGURE 4.5 – Schéma illustrant la vitesse de déplacement d'un front de flamme de pré-mélangée, en fonction d'une abscisse normale à celui-ci [89].

Les équations Eq.(4.8) et Eq.(4.7) font intervenir une unique grandeur, respectivement une espèce et la température. La question du coefficient de diffusion à employer n'apparaît alors pas pour ces deux définitions, puisqu'il s'agit dans un cas de la diffusivité moléculaire \mathcal{D}_k de l'espèce k considérée, dans l'autre de la diffusivité thermique \mathcal{D}_T . Toutefois, le choix d'un coefficient unique peut être ambigu dans le cas d'une définition de c multi-espèces Eq.(4.4). Une formulation de S_d spécifique à cette définition d'avancement doit donc être développée. Ainsi, en injectant la définition de c Eq.(4.4) dans la définition générique de S_d Eq.(4.6), on obtient une formulation de la vitesse de déplacement exacte, multi-espèce, et applicable à des mélanges stratifiés Eq.(4.9). Enfin, le développement de cette formulation aboutit à l'équation de S_d formulée comme Eq.(4.10) :

$$S_d = \frac{1}{|\nabla c|} \frac{D}{Dt} \left(\underbrace{\frac{1}{\frac{n_{C,CH_4} W_C Y_{CH_4}^{GF}}{W_{CH_4}}}}_{\text{constant car composition homogène}} \times \left(\frac{n_{C,CO} W_C}{W_{CO}} Y_{CO} + \frac{n_{C,CO_2} W_C}{W_{CO_2}} Y_{CO_2} \right) \right) \quad (4.9)$$

D'où :

$$S_d = \frac{1}{|\nabla c|} \left(\frac{n_{C,CH_4} W_C Y_{CH_4}^{GF}}{W_{CH_4}} \right) \times \left(\frac{n_{C,CO} W_C}{W_{CO}} \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{D}_{CO} \frac{W_{CO}}{W} \frac{\partial X_{CO}}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_{CO} \right] + \frac{n_{C,CO_2} W_C}{W_{CO_2}} \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{D}_{CO_2} \frac{W_{CO_2}}{W} \frac{\partial X_{CO_2}}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_{CO_2} \right] \right) \quad (4.10)$$

Dans cette étude, la vitesse de déplacement du front de réaction S_d est comparée, à iso-conditions thermodynamiques et iso-avancement, à la vitesse de déplacement d'une flamme laminaire S_L , et à celle d'un front d'AI S_{AI} estimée à partir de la théorie de Zeldovich (section 2.1). Les avancements sélectionnés sont $c = 0.03$ et $c = 0.50$, correspondant respectivement au "pied" du front de réaction (état proche-GF), et au "centre" du front de réaction. Ainsi, la vitesse de déplacement du front de réaction issue des calculs 1D est notée $S_d^{c=0.03}$ ou $S_d^{c=0.50}$, la vitesse de déplacement d'une flamme pré-mélangée laminaire $S_L^{c=0.03}$ ou $S_L^{c=0.50}$, la vitesse de déplacement d'un front

d'AI $S_{AI}^{c=0.03}$ ou $S_{AI}^{c=0.50}$, selon l'avancement étudié. Les vitesses de flamme laminaire et les vitesses de front d'AI théoriques sont respectivement évaluées à partir d'une flamme 1D adiabatique, et d'un réacteur 0D à pression constante, avec le solveur cinétique Cantera [38]. Ces valeurs permettent de remonter aux vitesses de déplacement évaluées à un avancement c donné Eq.(4.11) et Eq.(4.12).

$$S_L^c = S_L \left(\frac{\rho^{GF}}{\rho^c} \right) \quad (4.11) \quad S_{AI}^c = \frac{1}{|\nabla \tau_{AI}^c|} \left(\frac{\rho^{GF}}{\rho^c} \right) \quad (4.12)$$

Il est souligné que le terme τ_{AI}^c fait référence aux délais requis pour atteindre un avancement c donné. Les avancements sélectionnés ici étant $c = 0.03$ et $c = 0.50$, le calcul des vitesses $S_{AI}^{c=0.03}$ et $S_{AI}^{c=0.50}$ fait donc appel aux délais $\tau_{AI}^{c=0.03}$ et $\tau_{AI}^{c=0.50}$.

4.1.6.5 L'épaisseur du front de réaction

L'épaisseur du front de réaction représente l'étendue spatiale sur laquelle s'étend le processus de combustion. Dans cette étude, l'épaisseur est calculée de deux façons :

- La première notée δ_{reac} Eq.(4.13), traduit la raideur du front de réaction.
- La seconde notée Δ_{reac} Eq.(4.14) traduit la distance séparant des valeurs d'avancement représentatives d'un état proche-GF et proche-GB, à savoir $c_{min} = 0.03$ et $c_{max} = 0.97$.

Les valeurs $c_{min} = 0.03$ et $c_{max} = 0.97$ sont choisies de façon à évaluer l'épaisseur "totale" du front de réaction (i.e. la distance séparant les gaz frais des gaz brûlés).

En pratique, les critères d'avancement subissent un conditionnement tel que : $0.03 - \epsilon < c_{min} < 0.03 + \epsilon$ et $c_{max} = \max(c, 0.97 + \epsilon)$ avec $\epsilon = 5 \times 10^{-3}$. Le conditionnement de c_{max} permet notamment de calculer Δ_{reac} dès les premiers instants d'AI mettant en jeu des avancements inférieurs à $c_{max} = 0.97$. Les deux grandeurs δ_{reac} et Δ_{reac} sont ensuite comparées aux valeurs prises par une flamme laminaire pré-mélangée à iso-conditions, et notées δ_L et Δ_L , afin d'évaluer la proximité des profils et identifier le régime de combustion.

$$\delta_{reac} = \frac{1}{\max|\nabla c|} \quad (4.13) \quad \Delta_{reac} = \left| x(c = 0.03) - x(c = 97\%) \right| \quad (4.14)$$

4.1.7 Résultats en configuration mono-carburant

Sur la base des vitesses de déplacement S_d et des épaisseurs de front δ_{reac} relevées dans ces calculs 1D, un diagramme simplificateur comprenant 4 zones A, B, C, D a été construit, Fig.4.6. Ce dernier permet la classification des différents cas en quatre scénarios.

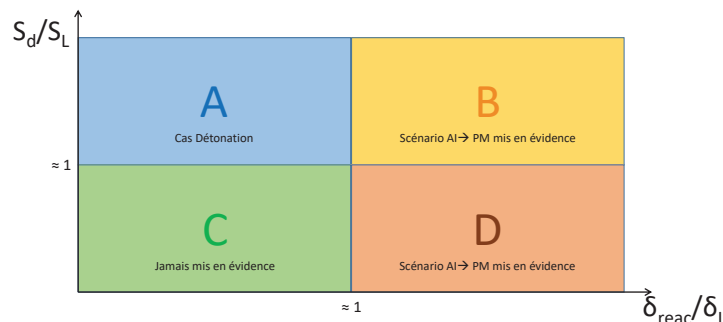


FIGURE 4.6 – Diagramme représentant la phénoménologie associée aux cas présentés ici. L'abscisse et l'ordonnée correspondent respectivement à la comparaison des épaisseurs et des vitesses de déplacement, entre le front de réaction et une flamme laminaire.

4.1.7.1 Cas A : conditions sans transition vers la déflagration

Le cas A implique une stratification de $1900K$ à $800K$ sur une étendue de $L_{spot} = 5.0cm$. Ce dernier induit une onde de pression de forte amplitude dépassant 10 bar (contre une pression moyenne de 1.0bar). Les zones

amont et aval à l'onde de pression sont respectivement à des températures GF et GB indiquant la combustion des gaz traversés par l'onde. Ainsi, cette dernière déclenche l'AI des gaz qu'elle traverse, et implique un couplage pression-réaction caractéristique des phénomènes de détonation Fig.4.7. Les épaisseurs de front de réaction mises en jeu par ce cas sont inférieures à l'épaisseur de flamme δ_L et sa vitesse de déplacement est évaluée à environ $700m/s$. Ce cas appartient donc au scénario A Fig.4.6. Toutefois, ce régime de combustion n'implique pas de transition vers un régime de déflagration, et ne correspond pas à l'objet de cette étude. Ce cas n'est donc pas discuté davantage.

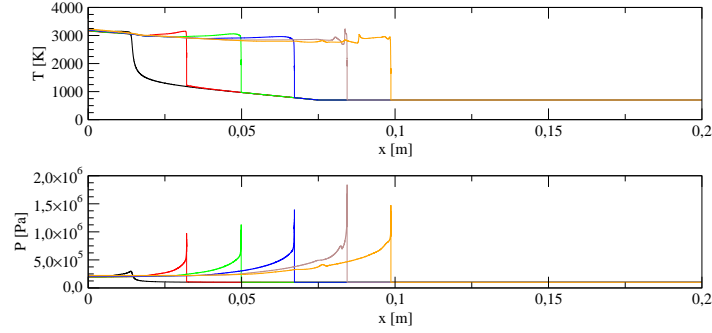


FIGURE 4.7 – Évolution spatiale de la température et de la pression pour un cas de détonation à différents instants (Cas A). La discontinuité de pression et l'interface GF/GB sont localisées aux mêmes points, témoignant d'un couplage pression-réaction.

4.1.7.2 Cas B et D : conditions avec observation de la transition vers la déflagration

Le cas B implique une stratification initiale de $1800K$ à $1000K$ sur une étendue $L_{spot} = 5.0cm$ et une transition vers un régime de déflagration est observée. En outre, cette transition AI→déflagration implique des vitesses de déplacement de front supérieures à S_L et des épaisseurs de front supérieures à δ_L . Ce cas appartient alors au scénario B Fig.4.6.

Le cas D implique une stratification de $1400K$ à $900K$ sur une étendue $L_{spot} = 5.0cm$. La réactivité étant plus faible que dans le cas B ($T_{max} = 1400K$ au lieu de $T_{max} = 1800K$), l'AI survient bien plus tardivement, autour de $t = 4.0ms$ (contre $t = 0.1ms$). Le cas D met toutefois en jeu une transition vers un régime de déflagration tout comme le cas B. Cette transition AI→déflagration implique des vitesses de déplacement inférieures à S_L , ainsi que des épaisseurs de flamme supérieures à δ_L . Ce cas appartient alors au scénario D Fig.4.6.

Vitesse de déplacement : La vitesse de déplacement du front de réaction S_d^c est comparée temporellement à celle d'une flamme laminaire S_L^c et celle d'un front d'AI S_{AI}^c (théorie de Zeldovich) pour des avancements $c = 0.03$ Fig.4.8a et 4.9a et $c = 0.50$ Fig.4.8b et 4.9b.

Cas B : Aux instants subséquents à l'AI, $S_d^{c=0.03}$ affiche des valeurs élevées (supérieures à $100m/s$), qui décroissent jusqu'à rejoindre des valeurs proches de $S_L^{c=0.03}$ autour de $t = 0.7ms$. Il est souligné qu'une période telle que $S_d^{c=0.03} < S_L^{c=0.03}$ apparaît entre $t = 0.4ms$ et $t = 0.7ms$, indiquant que le front de réaction marque un ralentissement transitoire, avant ré-accélérer de rejoindre une valeur proche de $S_L^{c=0.03}$ Fig.4.8a.

La vitesse de déplacement $S_d^{c=0.50}$ montre une évolution différente Fig.4.8b. Identiquement à $S_d^{c=0.03}$, $S_d^{c=0.50}$ admet aux premiers instants des valeurs supérieures à $100m/s$ puis décroît de façon monotone jusqu'à rejoindre des valeurs proches de $S_L^{c=0.50}$, autour de $t = 0.7ms$ Fig.4.8b. Toutefois, contrairement à $S_d^{c=0.03}$, $S_d^{c=0.50}$ n'affiche aucune période transitoire telle que $S_d^{c=0.50} < S_L^{c=0.50}$. Cela est attribué à un effet d'expansion/contraction du front de réaction accompagnant la transition AI→déflagration, phénomène davantage discuté en section 4.1.8.1. Bien que des divergences de comportement apparaissent, l'analyse de la vitesse de déplacement mesurée à $c = 0.03$ comme à $c = 0.50$, suggère une transition vers un régime de déflagration aux alentours de $t = 0.7ms$.

La comparaison entre S_d^c et S_{AI}^c pour $c = 0.03$ et $c = 0.50$ démontre par ailleurs une bonne prédictivité de la théorie de Zeldovich dans ce cas précis.

Cas D : Similairement au cas B, les valeurs $S_d^{c=0.03}$ et $S_d^{c=0.50}$ rejoignent respectivement les valeurs $S_L^{c=0.03}$ et $S_L^{c=0.50}$, suggérant alors la transition vers un régime de déflagration. Cela survient pour le cas D autour de $t = 4.1\text{ms}$ Fig.4.9a. Toutefois, contrairement au cas B, le cas D affiche sur l'ensemble de la période antérieure au régime de déflagration (i.e. avant $t = 4.1\text{ms}$), des vitesses de déplacement faibles telles que $S_d^{c=0.03} < S_L^{c=0.03}$. Également, $S_d^{c=0.50}$ affiche des valeurs relativement faibles dominant $S_L^{c=0.50}$ de façon moins significative que dans le cas B Fig.4.9b. Ces éléments indiquent que la propagation d'un front de réaction initié par AI n'implique pas nécessairement $S_d^c > S_L^c$, plus particulièrement pour des avancements faibles, comme $c = 0.03$. De plus, la comparaison entre S_d^c et S_{AI}^c ne montre pas de proximité entre ces deux valeurs pour le cas D, contrairement au cas B, ce qui tend à indiquer certaines limites de la théorie de Zeldovich. Cela est discuté de façon plus approfondie en section 4.1.10.

Épaisseur de front de réaction : L'épaisseur du front de réaction mesurée par les grandeurs δ_{reac} et Δ_{reac} est comparée temporellement avec δ_L et Δ_L Fig.4.8e et 4.8f (cas B) et Fig.4.9e et 4.9f (cas D)

Cas B : La valeur de δ_{reac} initialement très haute, décroît de façon monotone jusqu'à atteindre des valeurs de l'ordre de δ_L traduisant un amincissement continu du front de réaction (augmentation de $|\nabla c|$) Fig.4.8e. Cependant, Δ_{reac} adopte un comportement différent : les valeurs croissent dans un premier temps, puis décroissent jusqu'à rejoindre Δ_L Fig.4.8f, traduisant un effet d'expansion/contraction du front, en contraste avec la décroissance monotone affichée par δ_{reac} . Cette divergence de comportement sur les premiers instants de l'allumage est analysée en section 4.1.8.1. L'épaisseur du front estimée par δ_{reac} et Δ_{reac} tend toutefois à indiquer l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée aux environs de $t = 0.7\text{ms}$, tout comme l'analyse des vitesses de déplacement.

Cas D : L'évolution de δ_{reac} Fig.4.9e et Δ_{reac} Fig.4.9f est semblable à celle notée pour le cas B, et n'est donc pas détaillée davantage. Les grandeurs δ_{reac} et Δ_{reac} rejoignent des valeurs proches de δ_L et Δ_L autour de $t = 4.1\text{ms}$, ce qui suggère l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée au même instant que l'analyse des vitesses de déplacement $S_d^{c=0.03}$ et $S_d^{c=0.50}$.

Bilan diffusion/réaction : L'amplitude des termes de diffusion et de réaction du carburant CH_4 est comparée temporellement Fig.4.8d et 4.9d. Pour rappel, la dominance du terme de réaction est associée à un régime d'AI, tandis qu'un relatif équilibre diffusion/réaction est associé à un régime de déflagration.

Cas B : Premièrement dominé par la cinétique réactionnelle, le terme diffusif atteint progressivement une amplitude comparable au terme réactif Fig.4.8d. Cela met en évidence la transition d'un front piloté principalement par la cinétique réactionnelle, à un front gouverné par un équilibre diffusion/réaction, caractéristique d'un régime de déflagration. Ce relatif équilibre, bien que difficilement délimitable, semble s'établir entre $t = 0.5\text{ms}$ et $t = 1.5\text{ms}$. Cela est compatible avec l'analyse de S_d^c , δ_{reac} , et Δ_{reac} indiquant une transition autour de $t = 0.7\text{ms}$.

Cas D : Antérieurement à l'AI (i.e. avant $t = 4.0\text{ms}$) l'amplitude du terme diffusif est dominée par celle du terme réactif Fig.4.9d. Toutefois, l'AI est suivie rapidement d'un relatif équilibre diffusion/réaction autour de $t = 4.1\text{ms}$, suggérant l'établissement quasi-instantané d'un régime de déflagration une fois l'AI survenue. Ici encore, le bilan diffusion/réaction corrobore l'analyse de S_d^c , δ_{reac} , et Δ_{reac} indiquant la transition vers un régime de déflagration autour de $t = 4.1\text{ms}$.

4.1.7.2.1 Vitesse de consommation : La vitesse de consommation de carburant du front de réaction $\dot{\omega}_{reac}$ est comparée temporellement à celle d'une flamme pré-mélangée $\dot{\omega}_L$ Fig.4.8c et 4.9c.

Cas B : La phase d'emballlement thermique précédant l'AI (i.e. avant $t = 0.1\text{ms}$) est marquée par des valeurs de $\dot{\omega}_{reac}$ très faibles Fig.4.8c. L'AI s'accompagne de très forts taux de réaction tels que $\dot{\omega}_{reac} \gg \dot{\omega}_L$. La phase post-AI (i.e. après $t = 0.1\text{ms}$) montre une forte décroissance de la vitesse de consommation qui rejoint des valeurs proches de $\dot{\omega}_L$ autour de $t = 0.7\text{ms}$, ce qui corrobore l'établissement d'un régime de déflagration suggéré par

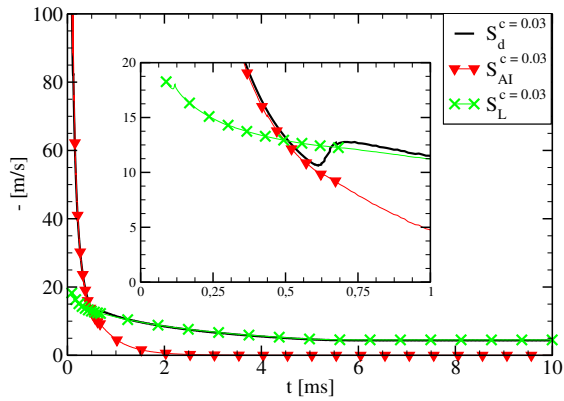
l'analyse de S_d^c , δ_{reac} , et Δ_{reac} .

Cas D : Identiquement au cas B, l'emballlement thermique (i.e. avant $t = 4.0\text{ms}$) entraîne des taux de consommation $\dot{\omega}_{reac}$ très faibles. Toutefois, contrairement au cas B, les valeurs $\dot{\omega}_{reac}$ ne dominent à aucun moment $\dot{\omega}_L$. En effet, l'AI survenant autour de $t = 4.0\text{ms}$ s'accompagne d'un accroissement des taux de réaction, lesquels rejoignent quasi-instantanément des valeurs proches de $\dot{\omega}_L$. Ce constat est en accord avec l'analyse S_d^c , δ_{reac} , et Δ_{reac} .

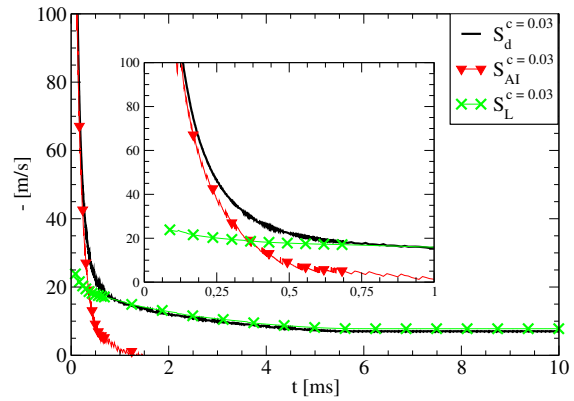
4.1.7.3 Cas C

Aucune configuration testée ici n'a permis de mettre en évidence l'apparition d'un front de réaction ayant à la fois une épaisseur inférieure à δ_L et une vitesse de déplacement inférieure à S_L . D'après la théorie des flammes laminares, la vitesse de flamme évolue en première approximation de façon inversement proportionnelle à son épaisseur [13]. Cela implique qu'un front de réaction plus mince qu'une flamme laminaire devrait avoir une vitesse de déplacement supérieure à S_L . L'hypothèse avancée ici est que de telles caractéristiques ne sont pas physiquement atteignables, du moins sur une telle configuration laminaire 1D non-étirée et isobare.

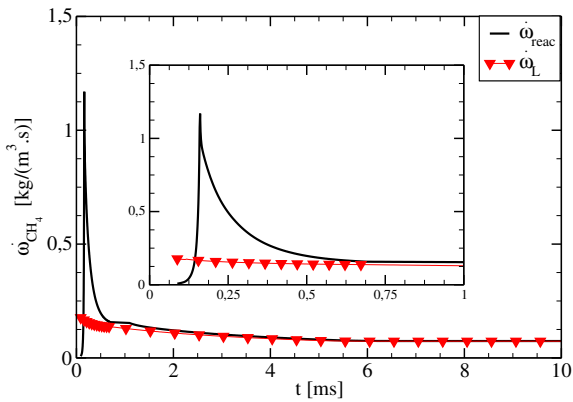
$$\delta_L \propto \frac{\mathcal{D}_T}{S_L} \tag{4.15}$$



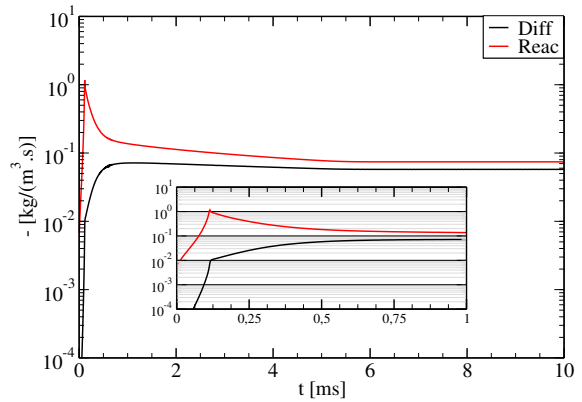
(a) Comparaison temporelle entre la vitesse de déplacement du front $S_d^{c=0.03}$, la vitesse théorique $S_{AI}^{c=0.03}$, et la vitesse de flamme laminaire $S_L^{c=0.03}$.



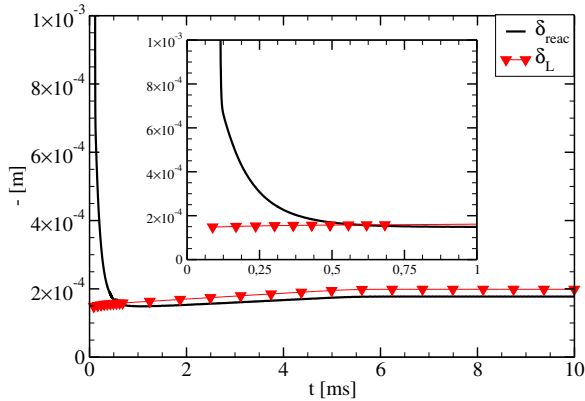
(b) Comparaison temporelle entre la vitesse de déplacement du front $S_d^{c=0.50}$, la vitesse théorique $S_{AI}^{c=0.50}$, et la vitesse de flamme laminaire $S_L^{c=0.50}$.



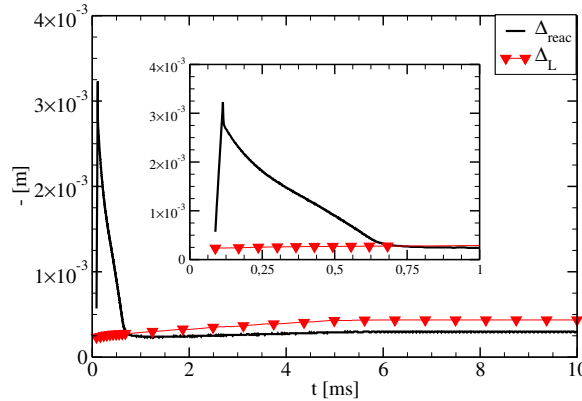
(c) Comparaison temporelle entre la vitesse de consommation du front de réaction $\dot{\omega}_{reac}$, et la vitesse de consommation d'une flamme pré-mélangée laminaire à iso-conditions $\dot{\omega}_L$.



(d) Comparaison temporelle entre les termes de diffusion et de réaction sur le carburant.

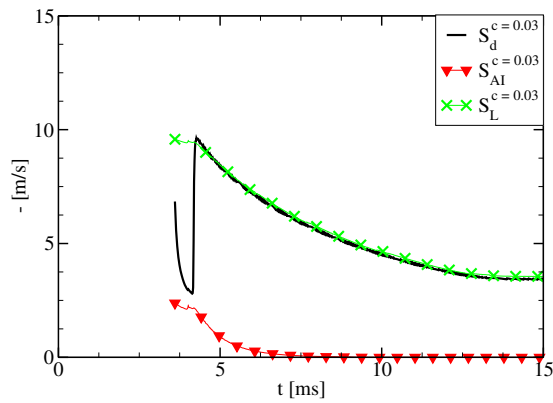


(e) Comparaison temporelle entre l'épaisseur du front de réaction δ_{reac} et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L .

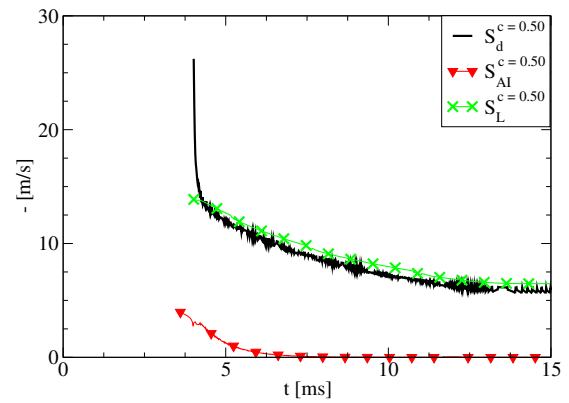


(f) Comparaison temporelle entre l'étendue du front de réaction Δ_{reac} et l'étendue d'une flamme laminaire Δ_L .

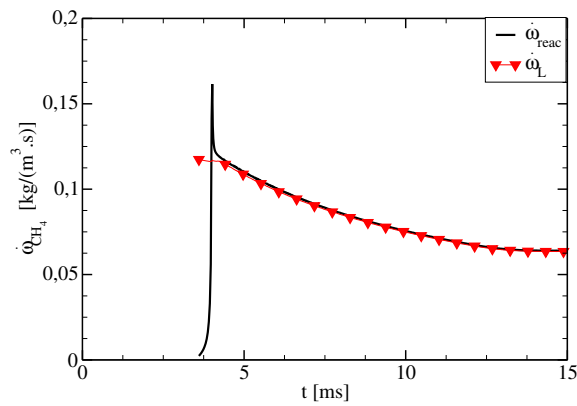
FIGURE 4.8 – Cas B



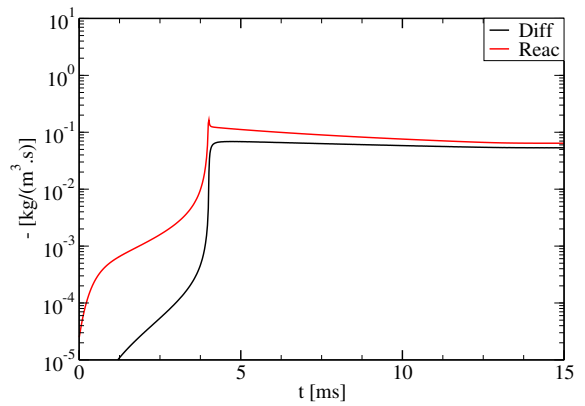
(a) Comparaison temporelle entre la vitesse de déplacement du front $S_d^{c=0.03}$, la vitesse théorique $S_{AI}^{c=0.03}$, et la vitesse de flamme laminaire $S_L^{c=0.03}$.



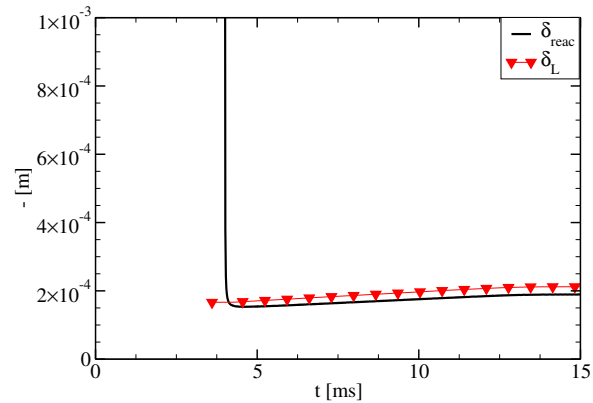
(b) Comparaison temporelle entre la vitesse de déplacement du front $S_d^{c=0.50}$, la vitesse théorique $S_{AI}^{c=0.50}$, et la vitesse de flamme laminaire $S_L^{c=0.50}$.



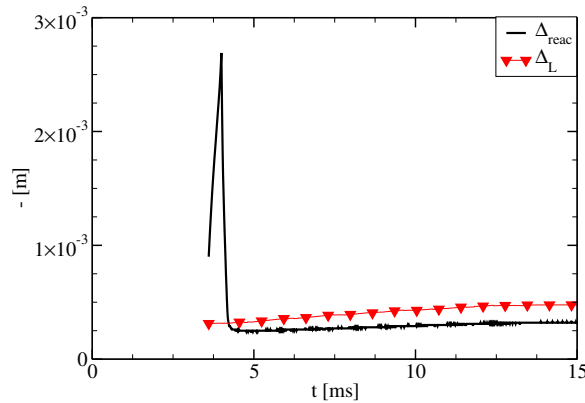
(c) Comparaison temporelle entre la vitesse de consommation du front de réaction $\dot{\omega}_{reac}$, et la vitesse de consommation d'une flamme pré-mélangée laminaire à iso-conditions $\dot{\omega}_L$.



(d) Comparaison temporelle entre les termes de diffusion et de réaction sur le carburant.



(e) Comparaison temporelle entre l'épaisseur du front de réaction δ_{reac} et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L .



(f) Comparaison temporelle entre l'étendue du front de réaction Δ_{reac} et l'étendue d'une flamme laminaire Δ_L .

FIGURE 4.9 – Cas D

4.1.8 Analyse phénoménologique

Pour rappel, le cas A n'est pas développé car hors du sujet d'étude, et le cas C n'a pas été rencontré. L'analyse phénoménologique suivante concerne donc les cas B et D, qualitativement similaires.

4.1.8.1 Épaisseur du front de réaction

Les deux visions de l'épaisseur du front de réaction, δ_{reac} et Δ_{reac} apportent des informations complémentaires qui permettent de comprendre le comportement du front de réaction durant la transition AI \rightarrow déflagration :

- $\delta_{reac} = 1/\max(|\nabla c|)$ représente la raideur de la zone réactive. L'avancement étant aux premiers instants proche de 0 en tout point du domaine, les gradients d'avancement sont par conséquent de faible amplitude, et impliquent des valeurs δ_{reac} élevées. L'accroissement des valeurs d'avancement s'accompagne également d'un accroissement des gradients d'avancement Fig.4.10 permettant in fine l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée.
- Δ_{reac} représente la distance séparant $c_{min} = 0.03$ et $c_{max} = \max(c, 0.97)$ et se comporte différemment de δ_{reac} . En effet, δ_{reac} affiche une décroissance monotone résultant d'un amincissement du front, tandis que Δ_{reac} se comporte de façon non-monotone et traduit un effet d'expansion/contraction du front de réaction. La phase de contraction du front de réaction résulte de l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée. À l'inverse, la phase d'expansion qui la précède met en évidence la propagation d'un front de réaction semi-développé : l'avancement minimal c_{min} progresse vers les zones moins réactives, tandis que c_{max} "stagne" à l'extrémité la plus réactive (gauche du domaine) jusqu'à atteindre la valeur seuil $c_{max} = \max(c, 0.97)$ Fig.4.10.

Cette expansion s'étend sur la durée nécessaire à c_{max} pour atteindre sa valeur seuil de $c_{max} = \max(c, 0.97)$. La phase de croissance de Δ_{reac} correspond donc en pratique au temps nécessaire à la zone de mélange la plus réactive pour passer d'un avancement $c_{min} = 0.03$ à $c_{max} = 0.97$. Une fois la valeur seuil $c_{max} = \max(c, 0.97)$ atteinte, c_{max} se déplace vers les gaz frais jusqu'à atteindre une distance critique de c_{min} pilotée par un relatif équilibre des termes diffusifs/réactifs.

Au regard des résultats présents, de forts gradients de réactivité favorisent des gradients d'avancement plus importants et donc l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée (Cas D). À l'inverse, des gradients de réactivité plus faibles favorisent des gradients d'avancement plus faibles également, et tendent à retarder l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée (Cas B). Ainsi, la transition AI \rightarrow déflagration est plus spontanée pour des mélanges fortement stratifiés, que pour des mélanges plus homogènes, ce qui corrobore les résultats d'analyses DNS rapportées dans la littérature (section 2.3).

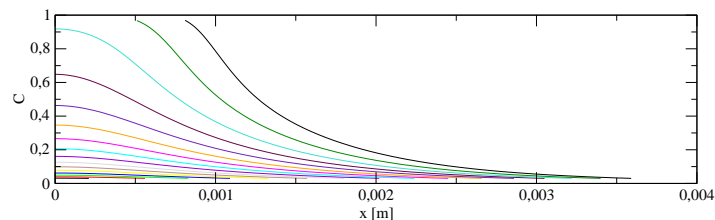


FIGURE 4.10 – Évolution spatiale de la variable d'avancement c comprise entre $c_{min} = 0.03$ et $c_{max} = 0.97$ à différents instants. Le développement du front de réaction en cours d'auto-inflammation implique aux premiers instants un front partiellement développé et très étendu, transitionnant progressivement vers un profil de flamme pré-mélangée plus mince.

4.1.8.2 Bilan diffusion/réaction

Le bilan diffusion/réaction réalisé sur le carburant permet de mettre en évidence la transition d'un régime essentiellement piloté par la cinétique réactionnelle vers un régime piloté par un relatif équilibre diffusion/réaction, caractéristique d'une propagation de flamme pré-mélangée. La dominance des phénomènes réactifs aux premiers

instants est attribuée aux forts taux de réaction de l'AI, ainsi qu'à la faible amplitude des gradients d'avancement. La transition AI→déflagration s'accompagne d'une contraction du front de réaction entraînant une amplification du flux diffusif. Cela mène in fine à l'établissement d'un relatif équilibre diffusion/réaction. À nouveau, la dominance du terme réactif s'atténue lorsque les gradients de réactivité augmentent, comme mis en évidence par la comparaison des cas B et D Fig.4.8d et 4.9d

4.1.8.3 Vitesse de déplacement

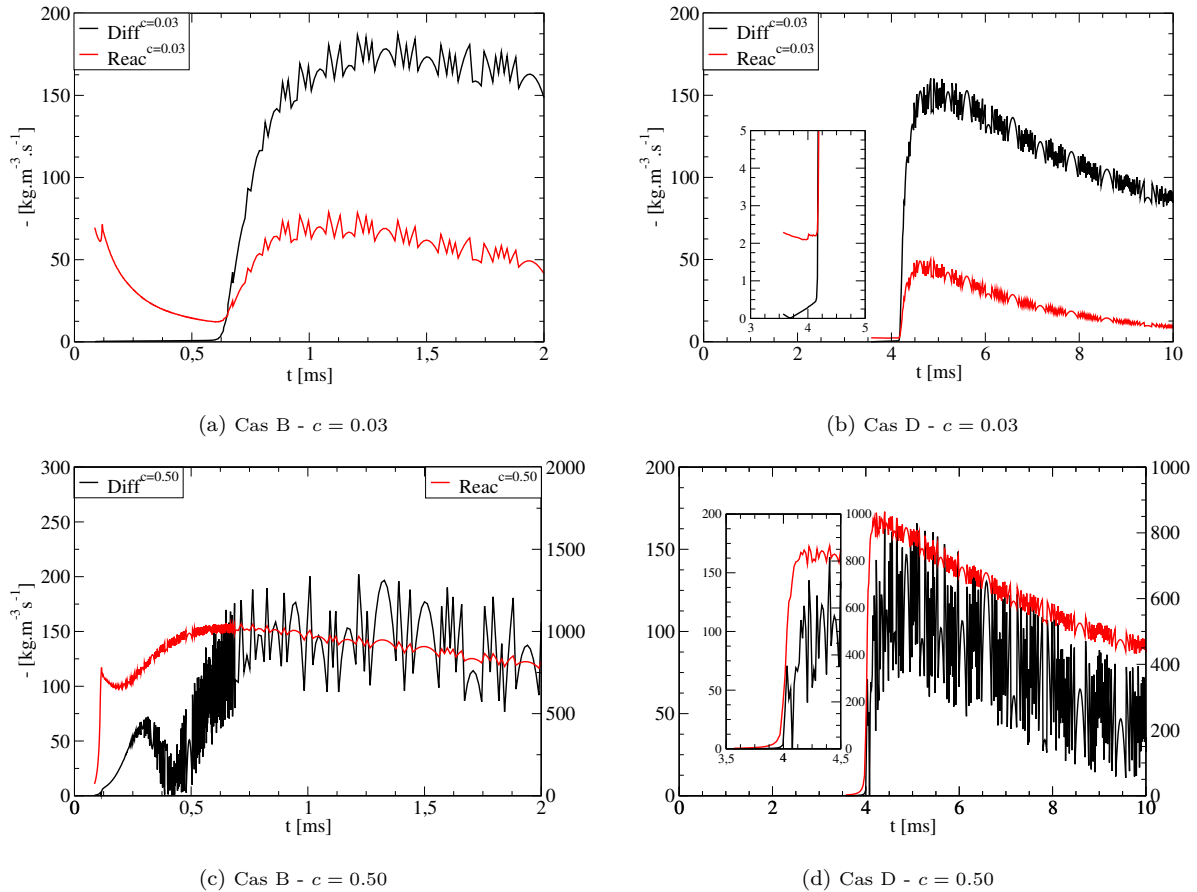


FIGURE 4.11 – Évolution temporelle du bilan diffusion/réaction au "pied" du front (*i.e.* $c = 0.03$) et au "milieu" du front (*i.e.* $c = 0.50$). Les premiers instants affichent une dominance importante du terme réactif à $c = 0.03$. Cette dominance est moins marquée à $c = 0.50$ en raison de gradients d'avancement supérieurs générant un terme diffusif plus important.

- $c = 0.03$ ("pied" du front) : Pour les cas B et D, $S_d^{c=0.03}$ affiche premièrement une décroissance, et atteint des valeurs sensiblement inférieures à $S_L^{c=0.03}$ Fig.4.8a et 4.9a. Cela est suivi d'une forte croissance telle que $S_d^{c=0.03}$ rejoint des valeurs de l'ordre de $S_L^{c=0.03}$, suggérant la transition vers un régime de déflagration.

Dans un premier temps (*i.e.* avant le pic de dégagement de chaleur par AI), l'AI s'accompagne de gradients d'avancement de faible amplitude, favorisant une dominance du terme réactif, ce qui répond aux hypothèses de la théorie de Zeldovich [136] décrites en section 2.1. En effet, pour le cas B, le "pied" du front de réaction progresse vers les zones moins réactives à une vitesse principalement conditionnée par la réactivité locale du mélange, et les phénomènes diffusifs ont une amplitude négligeable Fig.4.11a. Cela est moins vrai pour le cas D affichant un flux diffusif faible mais non-négligeable, dès les premiers instants de calcul Fig.4.11b. Cette propagation ralentit à mesure que la réactivité diminue, et peut alors atteindre des vitesses largement inférieures à $S_L^{c=0.03}$ comme pour le cas D Fig.4.9a.

Dans un second temps, la contraction du front de réaction s'accompagne de l'établissement d'un relatif équilibre diffusion/réaction. Le "pied" du front n'est alors plus essentiellement piloté par la réactivité du mélange, mais par un couplage diffusion/réaction. L'arrivée de phénomènes diffusifs est particulièrement brutale pour le "pied" du front de flamme, puisque leur amplitude augmente de façon très soudaine, autour de $t = 0.6\text{ms}$ pour le cas B Fig.4.11a, et $t = 4.2\text{ms}$ pour le cas D Fig.4.11b. Les flux thermiques et massiques vers le gaz frais entraînent une accélération du "pied" du front à l'instant où ces phénomènes diffusifs atteignent une amplitude significative. S'en suit une fusion entre $S_d^{c=0.03}$ et $S_L^{c=0.03}$ marquant la transition vers le régime de déflagration.

Synthétiquement, la phase telle que $S_d^{c=0.03} < S_L^{c=0.03}$ correspond à une période durant laquelle : (i) le front de réaction induit des flux diffusifs de faible amplitude, (ii) la réactivité au "pied" du front de flamme est trop faible pour en permettre la propagation à une vitesse supérieure à $S_L^{c=0.03}$.

- $c = 0.50$ ("milieu" du front) : Contrairement à $S_d^{c=0.03}$, $S_d^{c=0.50}$ montre une décroissance monotone vers des valeurs de l'ordre de $S_L^{c=0.50}$, pour les cas B et D Fig.4.8b et 4.9b. L'apparition de $c = 0.50$ est ultérieure à celle de $c = 0.03$ et intervient de facto à un instant, et dans une zone ("milieu" du front de réaction) impliquant localement un flux diffusif plus important (valeurs $|\nabla c|$ supérieures). En effet, pour les cas B et D, les termes diffusifs et réactifs augmentent simultanément, et la dominance du terme réactif est moins marquée à $c = 0.50$ Fig.4.11c et 4.11d qu'à $c = 0.03$ Fig.4.11a et 4.11b. Le flux diffusif permet la progression continue de cette zone du front réactif, indépendamment de la baisse de réactivité locale au "milieu du front" ($c = 0.50$) et explique l'absence du ralentissement transitoire mis en évidence au "pied" du front ($c = 0.03$) Fig.4.8a et 4.9a.

4.1.9 Synthèse des phénomènes pilotant la transition AI→déflagration en conditions mono-carburant

La phénoménologie associée à la propagation d'un front de flamme pré-mélangée initié par AI peut se résumer en trois étapes élémentaires :

- Premièrement, les gradients de réactivité entraînent une AI stratifiée. Le front de réaction en phase de développement (i.e. $\max(c) \rightarrow 1.0$) entame alors une propagation vers les régions moins réactives, et est essentiellement piloté par la réactivité du mélange.
- Deuxièmement, une fois le front de réaction pleinement développé (i.e. $\max(c) = 1.0$), celui-ci s'amincit, ce qui entraîne une intensification des phénomènes de diffusion Fig.4.10.
- Troisièmement, l'amincissement du front prend fin lorsque l'épaisseur δ_{reac} du front rejoint celle d'une flamme pré-mélangée δ_L . Un relatif équilibre diffusion/réaction s'établit, et marque la transition vers un régime de déflagration.

Ainsi, pour les cas mono-carburants testés ici, la transition AI→déflagration apparaît principalement pilotée par la contraction du front de réaction, et l'évolution de la vitesse de déplacement est conséquence de l'évolution du profil du front.

4.1.10 Évaluation de la validité de la théorie de Zeldovich

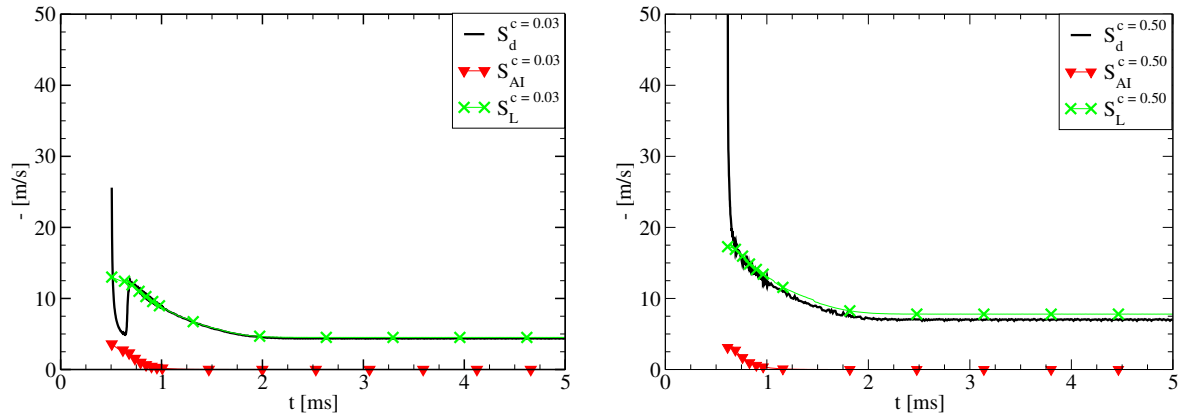
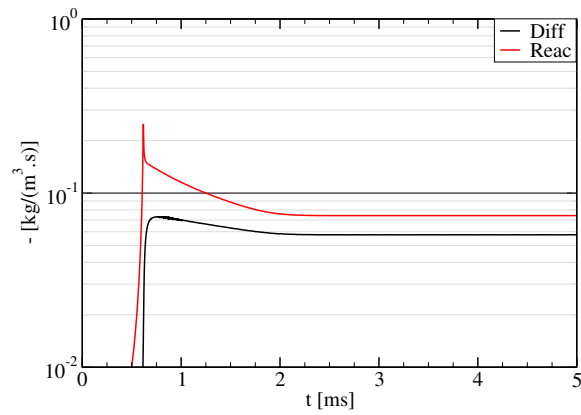
L'étude des cas B et D permet de confronter la vitesse de déplacement du front de réaction, à celle d'un front d'AI exprimé par la théorie de Zeldovich pour des avancements $c = 0.03$ et $c = 0.50$.

Pour rappel, la théorie de Zeldovich suppose l'influence des flux diffusifs négligeables dans la propagation d'un front d'AI, considérée uniquement pilotée par la cinétique réactionnelle des gaz. Dans cette section, une stratification en température allant de 1600K à 1000K , et 3 valeurs de L_{spot} ont été sélectionnées afin d'étudier l'influence du gradient de réactivité sur le bilan diffusion/réaction Fig.4.12c, 4.13c et 4.14c.

Une comparaison temporelle entre S_d^c , S_L^c , et S_{AI}^c et pour 3 cas différents est réalisée pour des avancements $c = 0.03$ Fig.4.12a, 4.13a et 4.14a et $c = 0.50$ Fig.4.12a, 4.13a et 4.14a. Ces cas font intervenir une transition

AI \rightarrow déflagration qualitativement analogue aux cas B et D analysés précédemment avec un régime de déflagration mis en évidence par une vitesse de déplacement et une épaisseur semblables à celles d'une flamme pré-mélangée. La phénoménologie de chaque cas n'est donc pas détaillée.

L'augmentation de L_{spot} accroît la dominance du terme réactif sur le terme diffusif Fig.4.12c, 4.13c et 4.14c. En effet, le cas $L_{spot} = 1.0\text{cm}$ présente une évolution de S_d^c relativement éloignée de S_{AI}^c , tandis que le cas $L_{spot} = 5.0\text{cm}$ affiche un accord très satisfaisant entre ces deux grandeurs. Le cas $L_{spot} = 3.0\text{ms}$ affiche un comportement intermédiaire. Cela confirme la validité de la théorie de Zeldovich [136] lorsque le terme diffusif est faible devant le terme réactif, et justifie l'hypothèse fondamentale sur laquelle elle repose. En pratique, les cas satisfaisant cette hypothèse mettent en jeu des valeurs S_{AI}^c sensiblement supérieures à des vitesses de flammes laminares S_L , indépendamment de l'avancement ciblé (cas $L_{spot} = 5.0\text{cm}$ Fig.4.14a, et cas D Fig.4.14b).

(a) Évolution temporelle de $S_d^{c=0.03}$, $S_{AI}^{c=0.03}$, $S_L^{c=0.03}$.(b) Évolution temporelle de $S_d^{c=0.50}$, $S_{AI}^{c=0.50}$, $S_L^{c=0.50}$.

(c) Évolution temporelle du bilan diffusion/réaction (termes intégrés sur tout le domaine).

FIGURE 4.12 – Cas $L_{spot} = 1.0\text{cm}$ - $T = 1600\text{K} \rightarrow 1000\text{K}$. Les termes diffusifs et réactifs sont comparables lors de l'allumage ($t = 0.7\text{ms}$). La théorie de Zeldovich prédit très mal la vitesse de déplacement du front de réaction. Cela est attribué à un terme diffusif de forte intensité ne permettant pas une dominance nette du terme réactif.

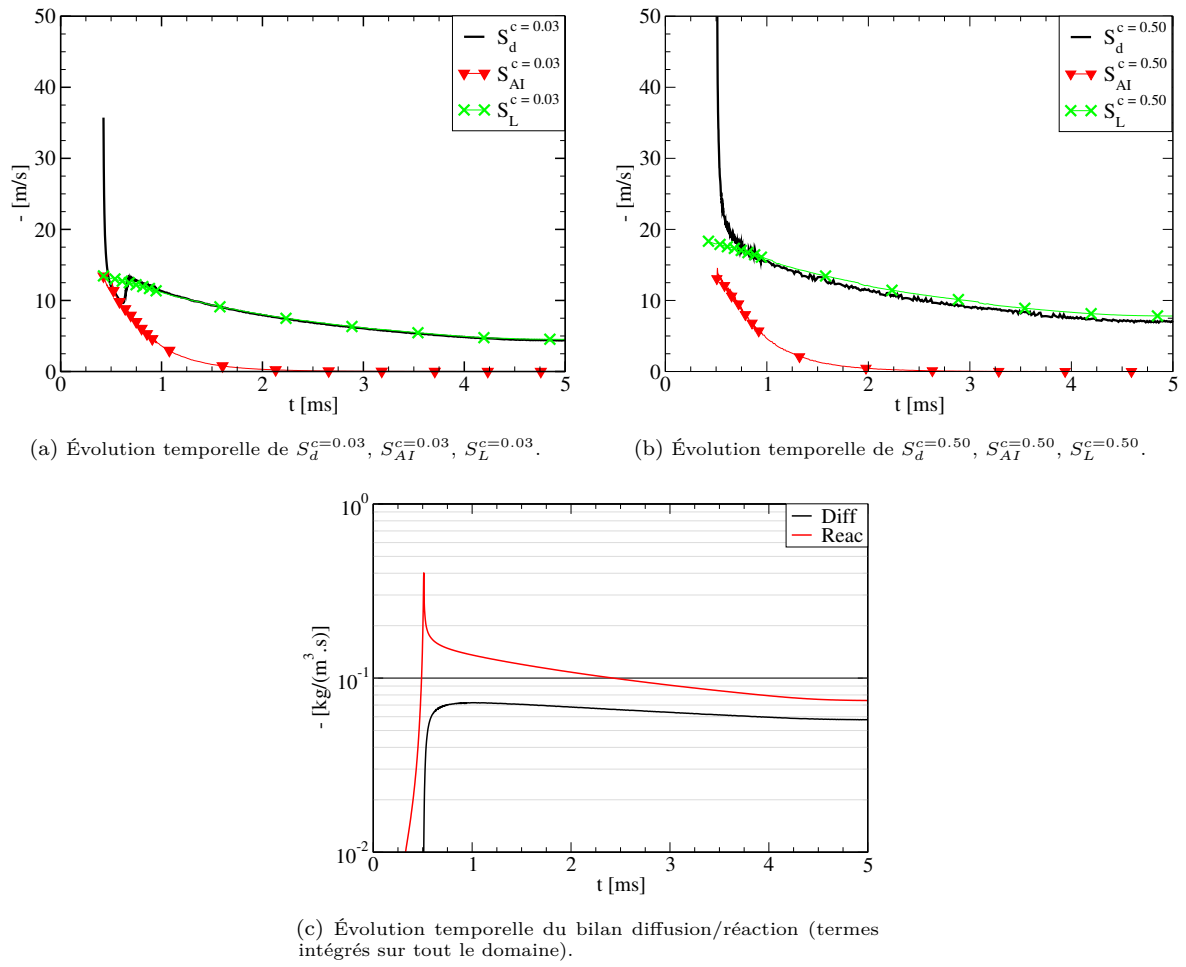


FIGURE 4.13 – Cas $L_{spot} = 3.0\text{cm}$ - $T = 1600\text{K} \rightarrow 1000\text{K}$. Les termes diffusifs et réactifs sont comparables lors de l’allumage ($t = 0.7\text{ms}$). La théorie de Zeldovich prédit mal la vitesse de déplacement du front de réaction. Cela est attribué à un terme diffusif de forte intensité ne permettant pas une dominance nette du terme réactif.

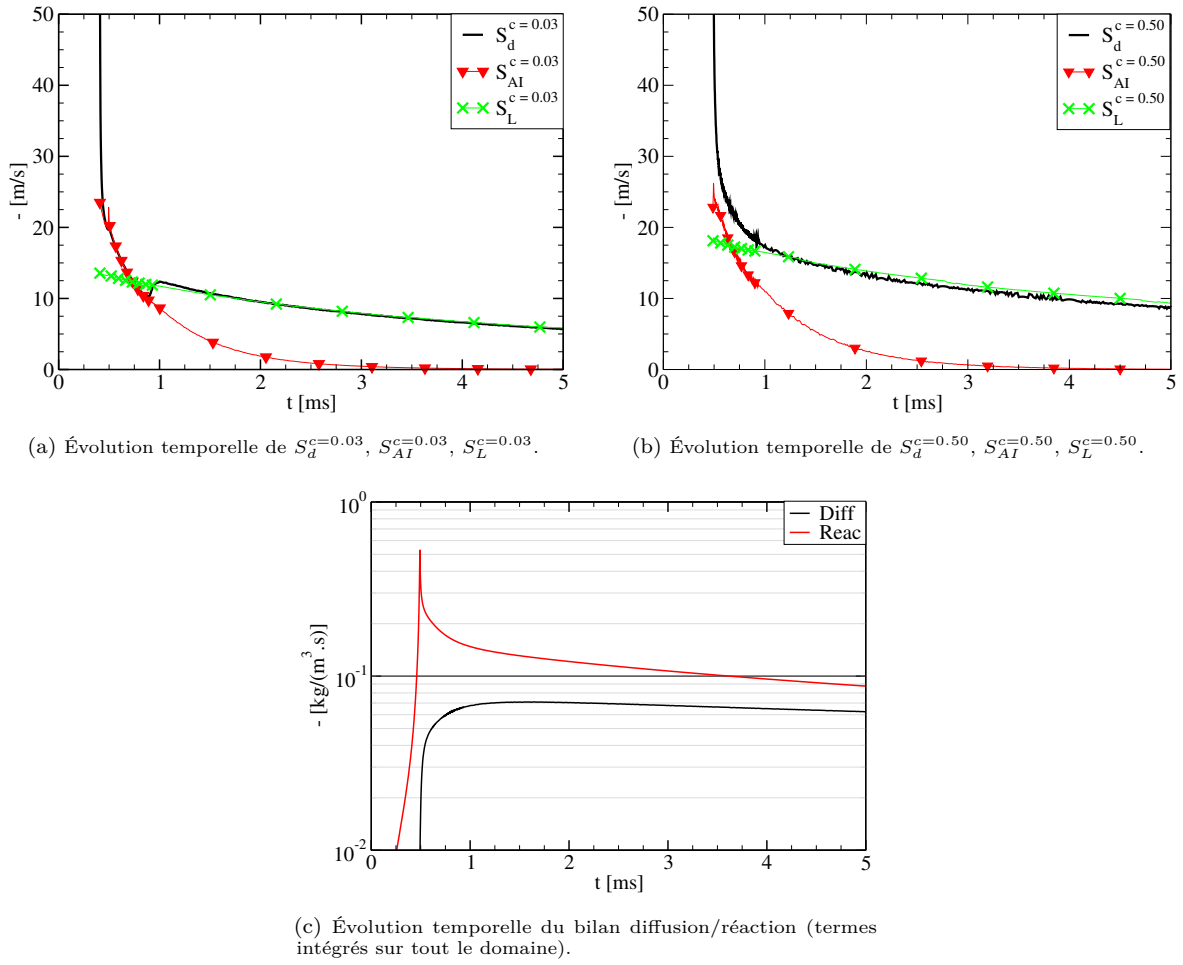


FIGURE 4.14 – Cas $L_{spot} = 5.0\text{cm}$ - $T = 1600\text{K} \rightarrow 1000\text{K}$. Les termes diffusifs et réactifs sont comparables lors de l’allumage ($t = 0.7\text{ms}$). La théorie de Zeldovich prédit correctement la vitesse de déplacement du front de réaction. Cela est attribué à un terme diffusif de faible intensité permettant la dominance nette du terme réactif.

4.1.11 Validité des critères de comparaison des vitesses S_d vs S_{AI} vs S_L

Ces travaux ont montré que des valeurs $S_d^c < S_{AI}^c$ pouvaient être rencontrées dès les premiers instants de l’AI, avant même que l’établissement d’un régime de flamme pré-mélangée ne se soit établi (cas D Fig.4.9a et 4.9b). La comparaison des vitesses S_{AI}^c vs S_L^c ne semble donc pas permettre de déterminer de façon universelle le régime de combustion dominant.

Les travaux DNS de Sakaran et al. [101] (section 2.1) proposent une comparaison entre la vitesse de déplacement du front et la vitesse de flamme laminaire, telle que :

- Si $S_{AI}^c > S_L^c$ il s’agit d’une propagation d’AI.
- Si $S_{AI}^c < S_L^c$ il s’agit d’une propagation de flamme pré-mélangée.

Il est toutefois observé dans les travaux présents que l’évolution temporelle de S_d^c au cours de la transition AI→déflagration dépend sensiblement de l’avancement où elle est calculée. En effet, $S_d^{c=0.50}$ montre une évolution monotone, contrairement à ce qui est observé pour $S_d^{c=0.03}$. Pour rappel, l’effet de ralentissement/accélération accompagnant la transition AI→déflagration est attribué à l’amplification des effets diffusifs dû à l’amincissement du front (discussion en section 4.1.8.2). En outre, $S_d^{c=0.03}$ peut atteindre des vitesses inférieures à $S_L^{c=0.03}$ sans pour autant qu’un profil de flamme pré-mélangée ne soit établi. De faibles avancements telles que $c = 0.03$ semblent donc peu adéquats pour distinguer les régimes d’AI et de déflagration. À l’inverse $S_d^{c=0.50}$ affiche une tendance monotone, et ne prend des valeurs proches de $S_L^{c=0.50}$ que lorsqu’un profil de flamme pré-mélangée est établi

(section 4.1.8.1).

L'étude de S_d^c à un avancement élevé tel que $c = 0.50$ apparaît donc comme un outil capable de déterminer le régime de combustion dominant, et corrobore la pertinence d'un critère de comparaison des vitesses tel que proposé par Sankaran et al. [101].

4.2 Étude *Dual-Fuel*

Cette section est dédiée à l'analyse de la transition AI→déflagration en conditions bi-carburant. L'étude présente une stratification en température, tout comme l'étude mono-carburant (section 4.1), mais aussi une stratification en composition, afin de représenter les conditions avoisinant le jet pilote en configuration moteur Dual-Fuel. En outre, ces travaux sont réalisés avec le solveur LES/RANS CONVERGE, co-développé par CSI (Convergent Science Incorporated) et IFPEN. Plusieurs raisons justifient l'utilisation de CONVERGE pour la suite des travaux :

- Premièrement, le solveur cinétique SAGE intégré à CONVERGE permet l'utilisation d'un schéma cinétique relativement lourd, capable de représenter des phénomènes complexes intervenant en conditions multi-carburant (AI de flamme froide/chaude, propagation de flamme pré-mélangée).
- Deuxièmement, CONVERGE maille le domaine de façon autonome, et économise à l'utilisateur une étape de maillage préliminaire au calcul. De même, des maillages adaptatifs (AMR - Adaptive Mesh Refinement) générés "à la volée" permettent une résolution plus fine de phénomènes locaux (noyau d'AI, front de flamme, dispersion d'un jet pilote...), conférant un avantage notable sur des cas d'applications réels 3D.

CONVERGE permet alors de s'affranchir d'une étape de réduction de mécanisme cinétique, à la fois pour l'analyse 1D présente, et pour les travaux 3D discutés ultérieurement (chapitres 6 et 7), mais aussi d'une étape de maillage potentiellement longue et fastidieuse. Enfin, l'objectif d'industrialisation du modèle de combustion envisagé dans le cadre de ces travaux (à plus ou moins longue échéance) a encouragé son développement au sein d'un code largement utilisé dans l'industrie.

4.2.1 Code de calcul

CONVERGE assure la résolution implicite ou semi-implicite des équations de l'aérothermochimie sur des maillages structurés, par la méthode des volumes finis appliquée à un schéma spatial d'ordre 1 ou 2. Dans ce travail, des schémas d'ordre 2 sont utilisés. Le couplage vitesse-pression est assuré par un algorithme PISO, et la progression temporelle est assurée par un schéma de Crank-Nicolson.

4.2.2 Maillage

Le maillage, ainsi que les conditions initiales utilisées dans cette étude sont les mêmes que celles utilisées dans l'étude préliminaire mono-carburant, et ne seront pas rappelés ici. Toutefois, les conditions thermodynamiques présentes (haute pression) imposent ici des maillage comprises entre $\Delta_x = 2\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 5\mu\text{m}$ permettant une résolution du front de flamme pré-mélangée sur environ 5 à 15 points selon les conditions thermodynamiques locales.

4.2.3 Conditions initiales

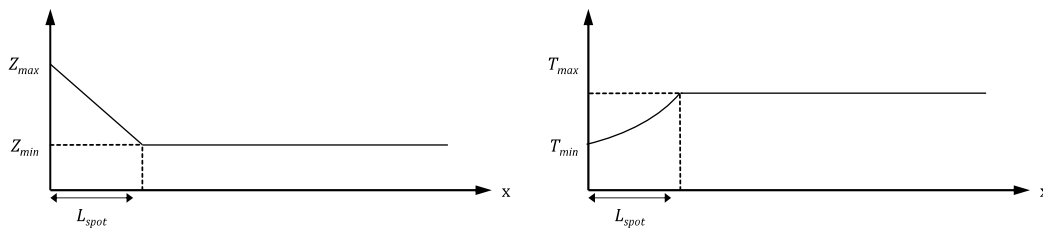


FIGURE 4.15 – Représentation des champs initiaux dans le domaine : Fraction de mélange à gauche et température GF à droite.

Les conditions thermodynamiques imposées ici représentent une zone de mélange adiabatique bi-carburant issue de l'injection d'un spray pilote n-dodécane au sein d'un mélange homogène air/méthane à une richesse de $\phi = 0.5$ et une température $T^{GF} = 900K$. Deux niveaux de pressions de $P = 15$ bar et $P = 60$ bar sont imposés, afin d'évaluer l'impact éventuel de la pression sur la transition AI→déflagration en conditions typiques-moteur.

Ainsi, les conditions thermodynamiques imposées à l'extrémité gauche du domaine (i.e. autour de Z_{max}) représentent les conditions au centre du jet pilote. Ce point présente une richesse maximale, et température GF minimale, telles que $Z_{max} = 0.42$, $\Phi|_{Z_{max}} = 10.7$ et $T^{GF}|_{Z_{max}} = 560K$. Les conditions à Z_{min} sont représentatives d'un pré-mélange air/ CH_4 pauvre, représentant la charge principale utilisée en configurations moteurs Dual-Fuel, telles que $Z_{min} = 0.033$, $\Phi|_{Z_{min}} = 0.5$ et $T^{GF}|_{Z_{min}} = 900K$. La composition et la température sont chacune bijective avec la fraction de mélange Z Eq.(4.16). La fraction de mélange non-normalisée construite sur la conservation des atomes de carbones et d'hydrogène présents dans le carburant [87] est utilisée ici Eq(4.16). À noter que la température GF varie non-linéairement avec Z Fig.4.15. Les conditions thermodynamiques à Z_{min} et Z_{max} sont dans la suite respectivement désignées "côté méthane" et "côté pilote".

$$Z = Y_C + Y_H = \sum_{k=1}^{n_{esp}} n_{C,k} \frac{Y_k \mathcal{W}_C}{\mathcal{W}_k} + \sum_{k=1}^{n_{esp}} n_{H,k} \frac{Y_k \mathcal{W}_H}{\mathcal{W}_k} \quad (4.16)$$

Quatre cas Dual-Fuel sont étudiés ici Tab.4.1 : A15, B15, A60 et B60. Ils partagent la même stratification en composition, cependant, l'étendue de cette stratification vaut $L_{spot} = 1.0mm$ pour A15 et A60, et $L_{spot} = 10.0mm$ pour B15 et B60. Deux niveaux de pression sont étudiés : 15 bar (cas A15 et B15), et 60 bar (cas A60 et B60).

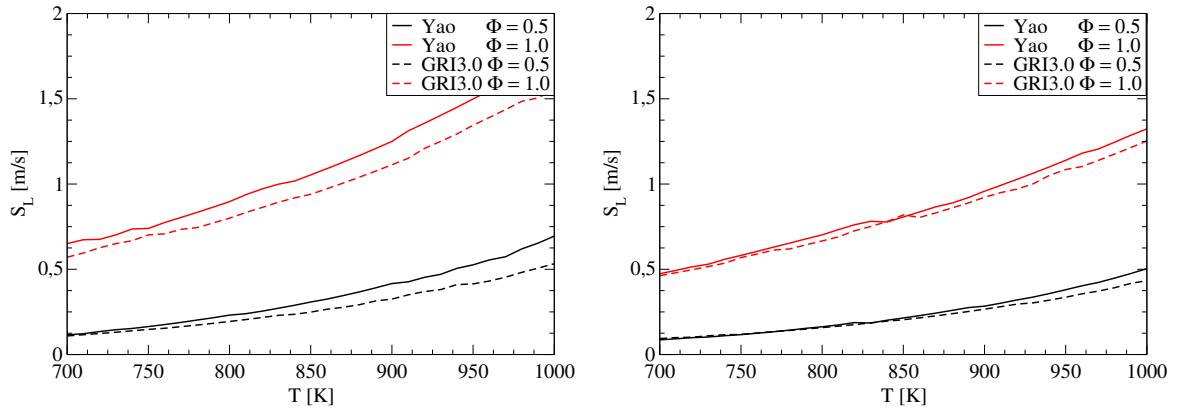
Cas	L_{spot} [mm]	Pression [bar]
A15	1.0	15
B15	10.0	15
A60	1.0	60
B60	10.0	60

TABLE 4.1 – Tableau récapitulatif des conditions rencontrées dans les cas A15, B15, A60, B60. À noter que la ligne de mélange est inchangée entre ces cas.

4.2.4 Schéma réactionnel

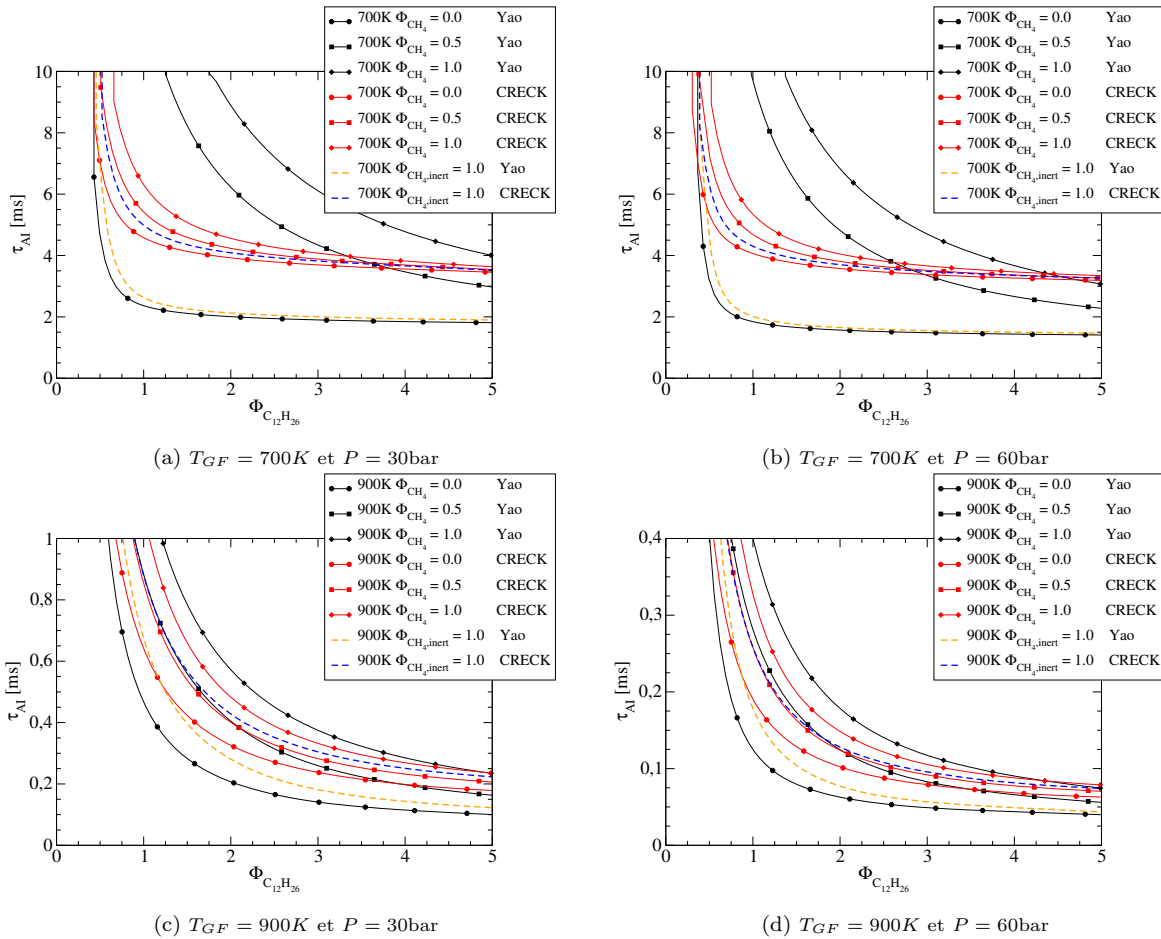
Le schéma cinétique réduit de Yao et al. [128] (54 espèces, 269 réactions) est utilisé ici. Ce schéma représente la combustion du n-dodécane, mais comporte également l'espèce CH_4 et permet de représenter la combustion Dual-Fuel à base de ces deux carburants. Sa capacité à représenter des délais d'AI Fig.4.17 et des vitesses de flamme laminaire réalistes Fig.4.16, tout en conservant un nombre d'espèces acceptable dans le cadre de calculs 3D LES, ont encouragé l'usage de ce mécanisme. Ce schéma est par ailleurs utilisé par Khalila et al. [50] et Tegköl et al. [118] en configuration LES 3D Diesel/Dual-Fuel, dans des conditions relatives au spray A de l'ECN (Engine Combustion Network). La comparaison expérience/simulation conduite par les auteurs sur les calculs Diesel suggère une représentativité des délais d'AI correcte par le schéma de Yao et al. [128].

La comparaison des délais d'AI issus du schéma réduit de Yao et al. [128] et d'un schéma détaillé (492 espèces, 17790 réactions) développé par Ranzi et al. [90] montre cependant les limites du schéma réduit. Des écarts significatifs montrent les capacités potentiellement limitées du schéma de Yao et al. [128] à capter certaines réactions à basse température Fig.4.17. De plus, l'effet inhibiteur du méthane est plus marqué pour le schéma réduit que pour le schéma détaillé. Par ailleurs, l'ajout du méthane comme espèce inerte souligne que le rôle inhibiteur du méthane résulte principalement d'une action chimique de cette espèce, et non d'un effet "diluant".



(a) Évolution de S_L en fonction de la température gaz frais à $P = 30$ bar. (b) Évolution de S_L en fonction de la température gaz frais à $P = 60$ bar.

FIGURE 4.16 – Comparaison des schémas de Yao *et al.* [128] (54 espèces, 269 réactions) et GRI3.0 [111] (53 espèces, 325 réactions) sur des vitesses de flamme laminaire S_L à $P = 30$ Bar (gauche) et $P = 60$ bar (droite).



(a) $T_{GF} = 700K$ et $P = 30bar$

(b) $T_{GF} = 700K$ et $P = 60bar$

(c) $T_{GF} = 900K$ et $P = 30bar$

(d) $T_{GF} = 900K$ et $P = 60bar$

FIGURE 4.17 – Comparaison des schémas de Yao *et al.* [128] (54 espèces, 269 réactions) et Ranzi *et al.* [90] (492 espèces, 17790 réactions) sur des réacteurs homogènes à pression constante, pour un mélange *Dual-Fuel*. Les courbes comportant du méthane ajouté en tant qu'espèce inerte distingue son effet inhibiteur chimique, de son effet diluant.

4.2.5 Méthodologie de post-traitement

La méthodologie d'étude adoptée en configuration mono-carburant est ré-utilisée ici. L'introduction d'une stratification en composition impose cependant l'adaptation des outils préalablement développés. Seules ces adaptations

sont décrites ici.

4.2.5.1 Variable de progrès

La définition de l'avancement est adaptée pour prendre en compte les hétérogénéités de composition via un bilan de conservation des atomes de carbone. Les principaux produits carbonés considérés ici étant CO , CO_2 pour des richesses inférieures à $\phi = 2.0$, ces derniers sont choisis pour définir l'avancement de réaction. Toutefois, cette définition ne permet pas de décrire l'avancement pour l'ensemble des conditions de richesse imposées ici. En effet, l'avancement n'atteint la valeur de $c = 1.0$ côté GF que jusqu'à des richesses de l'ordre de $\phi = 2.0$. Pour des richesses supérieures à $\phi = 2.0$, la composition des gaz brûlés comporte d'autres espèces (dont du méthane imbrûlé), et l'avancement ne se résume plus essentiellement aux espèces CO , CO_2 , voir Fig.4.18c.

Néanmoins, l'allumage du mélange stratifié intervient autour d'une richesse de l'ordre de $\phi = 2.0$, comme visible en figure Fig.4.19. La transition AI→déflagration "coté méthane" intervient alors pour l'ensemble des cas présents à des richesses inférieures ou égales à $\phi = 2.0$, pour lesquelles cette définition est considérée valide. La phénoménologie "coté pilote" impliquant une éventuelle transition AI→déflagration n'est pas étudiée ici, pour deux raisons :

Premièrement, l'intérêt de la technologie Dual-Fuel est de générer, à partir d'une injection pilote, une propagation de flamme au sein d'une charge pré-mélangée pauvre (i.e. coté méthane). L'intérêt d'étudier la combustion dans des conditions représentatives du centre du spray pilote paraît donc limité. Deuxièmement, la définition de l'avancement utilisée ici n'est pas valide pour des richesses supérieures à $\phi = 2.0$.

$$c = \frac{\frac{n_{C,CO}W_C}{W_{CO}} Y_{CO} + \frac{n_{C,CO_2}W_C}{W_{CO_2}} Y_{CO_2}}{\sum_{k=1}^{n_{esp}} \frac{n_{C,k}W_C}{W_k} Y_k} \quad (4.17)$$

Identiquement à l'étude mono-carburant, la bijectivité de l'avancement avec l'espace et le temps est vérifiée sur des flammes pré-mélangées 1D et des réacteur 0D à pression constante, voir Fig.4.18a et 4.18b.

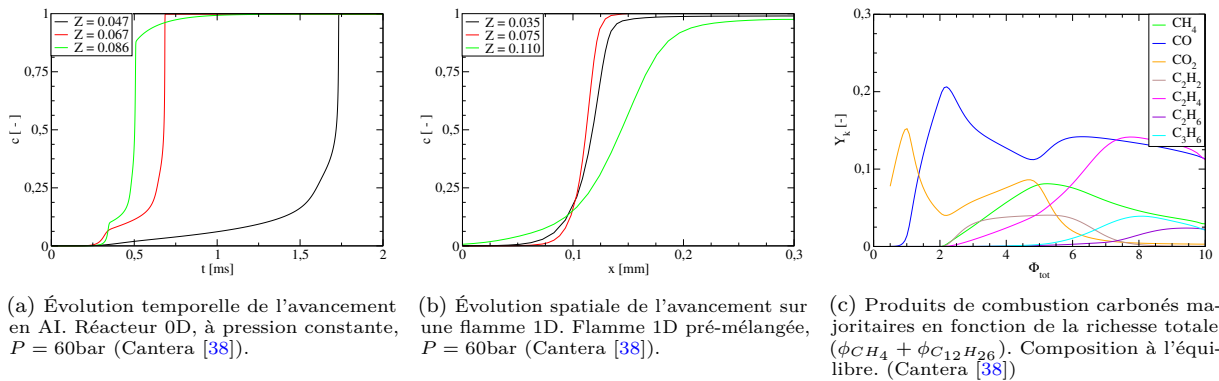


FIGURE 4.18 – Étude du comportement de la variable d'avancement Eq.(4.17). L'avancement est bijectif en temps et en espace. Les conditions GF Fig.4.18a et 4.18b correspondent à celles imposées dans les calculs A60 et B60, pour trois fractions de mélange distinctes. Les richesses supérieures à $\phi = 2.0$ comportent des produits de combustion carbonés autres que CO et CO_2 Fig.4.18c.

4.2.5.2 Vitesse de déplacement S_d

La modification de la définition de l'avancement en configuration Dual-Fuel implique une reformulation de la vitesse de déplacement exprimée comme Eq.(4.20).

$$S_d = \frac{1}{|\nabla c|} \frac{D}{Dt} \left(\underbrace{\frac{1}{\sum_{k=1}^{n_{esp}} \frac{n_{C,k} W_C}{W_k} Y_k}}_u \times \underbrace{\left(\frac{n_{C,CO} W_C}{W_{CO}} Y_{CO} + \frac{n_{C,CO_2} W_C}{W_{CO_2}} Y_{CO_2} \right)}_v \right) \quad (4.18)$$

$$\frac{D}{Dt} u = - \frac{\overbrace{\sum_{k=1}^{n_{esp}} \left(\frac{n_{C,k} W_C}{W_k} \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \right] \right)}^{\text{conservation de la masse de carbone}}}{\left(\sum_{k=1}^{n_{esp}} \frac{n_{C,k} W_C}{W_k} Y_k \right)^2} \quad (4.19)$$

D'où :

$$S_d = \frac{1}{|\nabla c| \sum_{k=1}^{n_{esp}} \frac{n_{C,k} W_C}{W_k} Y_k} \times \left(\frac{n_{C,CO} W_C}{W_{CO}} \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{CO} \frac{W_{CO}}{W} \frac{\partial X_{CO}}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_{CO} \right] + \frac{n_{C,CO_2} W_C}{W_{CO_2}} \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{CO_2} \frac{W_{CO_2}}{W} \frac{\partial X_{CO_2}}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_{CO_2} \right] \right) \quad (4.20)$$

4.2.6 Résultats en configuration *Dual-Fuel*

La stratification en composition et température imposée aux cas présents entraîne l'apparition d'un point d'AI autour de la fraction de mélange la plus réactive Z_{MR} située entre Z_{min} et Z_{max} . Cette fraction Z_{MR} se trouve alors à des richesses de l'ordre de $\phi \approx 2.0$ Fig.4.19a et 4.19b. Ce point d'AI entraîne la propagation de deux fronts de réactions : l'un se déplace vers des richesses plus fortes "côté pilote", l'autre vers des richesses plus faibles, "côté méthane". Ces deux branches sont dénommées dans la suite "branche pauvre" et "branche riche".

Comme exprimé en section 4.2.5.1, seule la transition AI→déflagration "côté méthane" est étudiée ici. Pour ce faire, un seuil de richesse $\phi < 2.0$ est appliqué aux post-traitements discutés ici, à l'exception du dégagement de chaleur.

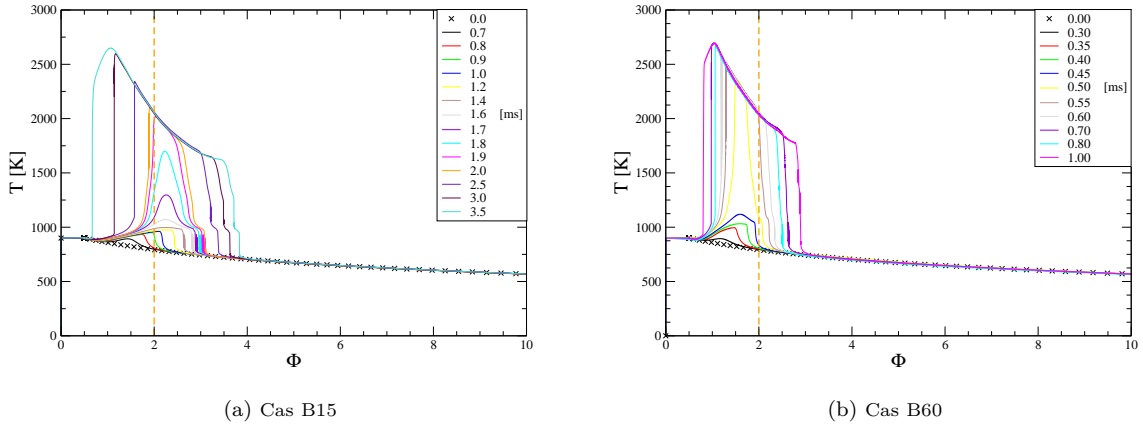
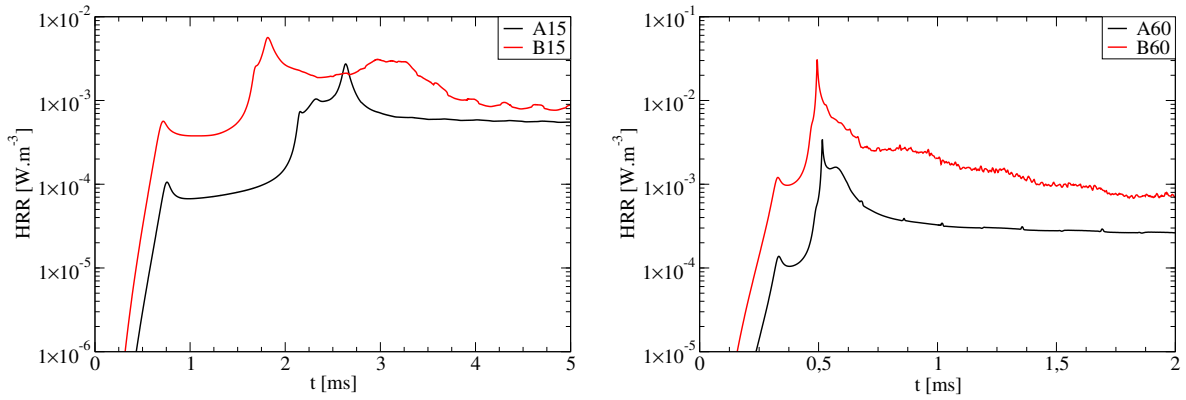


FIGURE 4.19 – Développement du front de réaction aux premiers instants dans l'espace T - ϕ . La ligne discontinue orange représente une richesse $\phi = 2.0$ proche de la fraction de mélange la plus réactive.

4.2.6.1 Analyse du taux de dégagement de chaleur pour les différents cas

Le taux de dégagement de chaleur des calculs Dual-Fuel présente une évolution en deux, voire trois étapes visibles par des pics distincts. Pour chaque cas, le premier pic est attribué à l'apparition de la chimie de flamme froide (LTC), et le second à l'AI de flamme chaude (HTC).

Les cas A15 et B15 présentent toutefois un troisième pic, respectivement centrés autour de $t = 2.8$ ms et $t = 1.8$ ms. Ceux-ci sont attribués au passage du front de réaction (branche pauvre) dans la région proche-stœchiométrique responsable d'un dégagement d'énergie important. L'absence de ce troisième pic pour les cas A60 et B60 est attribuée aux valeurs de Z_{MR} inférieures par rapport A15 et B15 (la zone d'AI est plus proche de la stœchiométrie), ainsi qu'aux gradients de réactivité plus faibles favorisant un allumage plus homogène. Pour A60 et B60, le second pic d'AI (HTC) inclut donc notamment la combustion de la zone proche-stœchiométrique, ce qui ne permet pas à celle-ci de se distinguer comme dans les cas A15 et B15. Enfin, l'apparition progressive d'un "plateau" de dégagement de chaleur est attribué à l'établissement d'un régime de propagation de flamme pré-mélangée au sein de la zone non-stratifiée, "côté méthane". Les arguments justifiant cette affirmation sont discutés en section 4.2.6.4 et 4.2.6.5.



(a) Dégagement de chaleur des cas A15 et B15, différent dans ces deux cas : $t = 2.2$ ms pour A15 contre $t = 1.6$ ms pour B15. (b) Dégagement de chaleur des cas A60 et B60, simultané pour ces deux cas : $t = 0.6$ ms.

FIGURE 4.20 – Évolution temporelle du taux de dégagement de chaleur global.

4.2.6.2 Analyse du bilan diffusion/réaction

Le bilan diffusion/réaction pour les cas Dual-Fuel est réalisé sur la variable d'avancement c , et sur des richesses inférieures à $\phi = 2.0$ afin d'isoler la branche pauvre. Ces deux termes sont alors formulés comme Eq.(4.22) et Eq.(4.21) :

$$\text{Diff} = \sum_{k=CO_2,CO} \int \frac{n_{C,k} \mathcal{W}_C}{\mathcal{W}_k} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \mathcal{D}_k \frac{\mathcal{W}_k}{\mathcal{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) \right] dv \Big|_{\phi < 2.0} \quad (4.21)$$

$$\text{Reac} = \sum_{k=CO_2,CO} \int \frac{n_{C,k} \mathcal{W}_C}{\mathcal{W}_k} \dot{\omega}_k dv \Big|_{\phi < 2.0} \quad (4.22)$$

Tout comme dans l'étude mono-carburant (section 4.1.8.2) les cas Dual-Fuel affichent une dominance du terme réactif aux premiers instants de calcul, à l'exception de A15. Il s'en suit l'établissement progressif d'un relatif équilibre diffusion/réaction, suggérant un régime de déflagration autour de $t = 2.5$ ms (A15), $t = 3.0$ ms (B15), $t = 0.6$ ms (A60), $t = 0.7$ ms (B60). Identiquement aux tendances relevées dans le cadre mono-carburant (section 4.1.10), la valeur de L_{spot} modifie sensiblement le bilan diffusion/réaction durant l'AI. En effet, l'augmentation de L_{spot} accentue le dominance du terme réactif sur le terme diffusif aux premiers instants de calcul (comparer A15 avec B15 Fig.4.21a et 4.21b, et A60 avec B60 Fig.4.21c et 4.21d).

Il est toutefois souligné que le cas A15 est piloté par un relatif équilibre diffusion/réaction durant tout le calcul, y compris entre les instants $t = 0.8\text{ms}$ et $t = 2.5\text{ms}$ séparant l'AI de flamme froide (LTC) et chaude (HTC). Cela suggère un rôle significatif des effets diffusifs sur l'AI, et est discuté dans la section suivante.

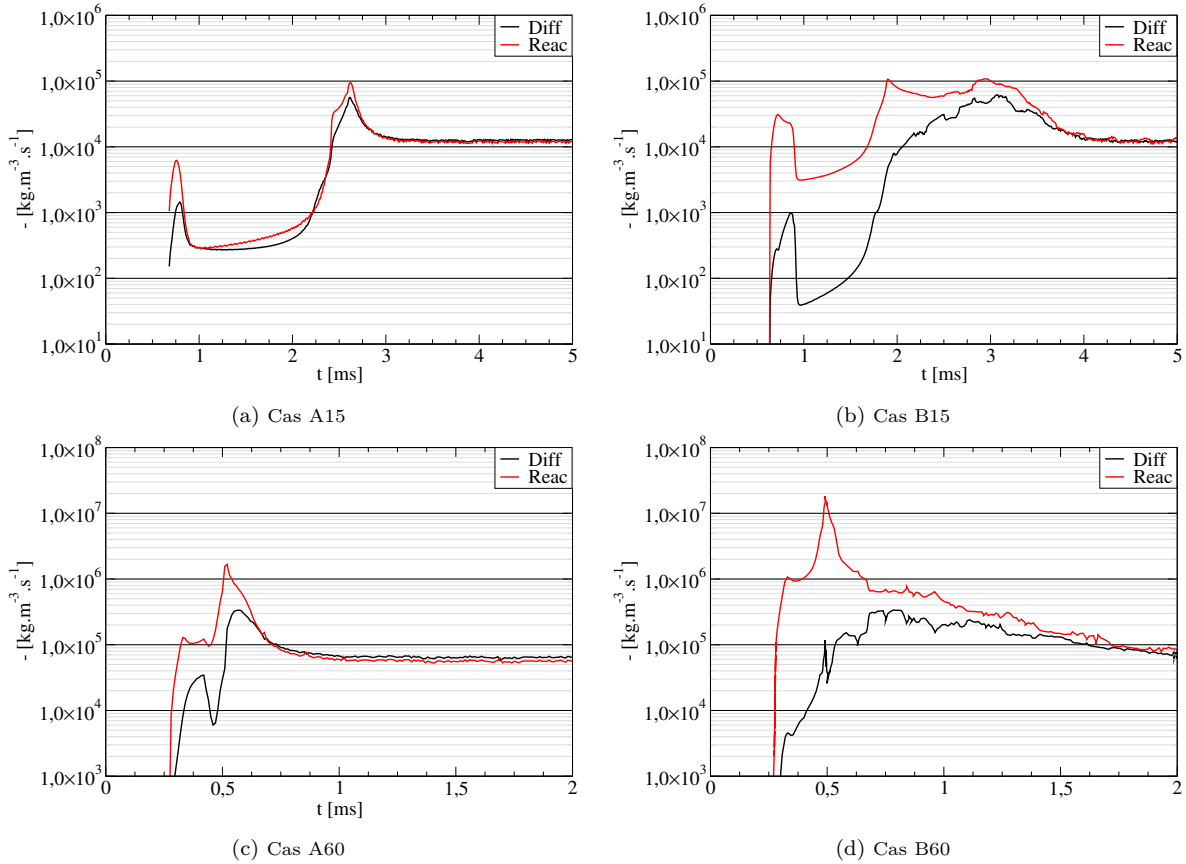


FIGURE 4.21 – Évolution temporelle des termes de diffusion et de réaction. Les premiers instants de calcul sont marqués par une dominance du terme réactif, excepté A15 Fig.4.21a. La transition AI→déflagration est accompagnée d'un relatif équilibre diffusion/réaction.

4.2.6.3 Influence du taux de dissipation scalaire sur l'AI

L'AI en milieu stratifié adopte aux premiers instants une structure de flamme de diffusion. Le niveau de stratification peut être évalué par le taux de dissipation scalaire, calculé dans ce travail comme Eq.(4.23) :

$$\chi = \mathcal{D}_c \frac{\partial Z}{\partial x} \frac{\partial Z}{\partial x} \quad (4.23)$$

avec le coefficient de diffusion de l'avancement calculé comme : $\mathcal{D}_c = \frac{\mathcal{D}_{CO}Y_{CO} + \mathcal{D}_{CO_2}Y_{CO_2}}{Y_{CO} + Y_{CO_2}}$.

Ainsi, le cas A15 présente un taux de dissipation scalaire à la stœchiométrie de l'ordre $\chi_{st} \approx 1.0\text{s}^{-1}$, contre $\chi_{st} \approx 0.01\text{s}^{-1}$ pour B15. Les cas A60 et B60 présentent des taux de dissipation scalaire de l'ordre de $\chi_{st} \approx 0.25\text{s}^{-1}$ et $\chi_{st} \approx 0.0025\text{s}^{-1}$, respectivement.

Il est souligné qu'en dépit de conditions thermodynamiques identiques (excepté l'étendue du gradient L_{spot}), l'AI de flamme chaude (HTC) intervient autour de $t = 2.3\text{ms}$ pour A15, contre $t = 1.5\text{ms}$ pour B15, ce qui représente un écart relatif proche de 50%. Ce retard est attribué aux phénomènes diffusifs s'appliquant au noyau d'AI (effets de dissipation scalaire), bien plus importants pour A15 Fig.4.21a que pour B15 Fig.4.21b, et tendant à retarder l'allumage comme souvent rapporté dans la littérature [7, 60, 68, 77]. Les cas A60 et B60 présentent des délais d'AI (HTC) identiques ($t = 0.6\text{ms}$), ce qui suggère que leurs conditions thermodynamiques sont défavorables à l'apparition d'effets de dissipation scalaire.

4.2.6.4 Analyse de la vitesse de déplacement

Tout comme pour l'analyse mono-carburant (section 4.1.8.3), une analyse de S_d en configuration Dual-Fuel est basée sur deux valeurs d'avancement : $c = 0.03$ ("pied" du front) et $c = 0.50$ ("milieu" du front). Les valeurs de S_d^c sont ensuite comparées aux valeurs S_{AI}^c et S_L^c , à iso-conditions thermodynamiques et iso-avancement.

- $c = 0.03$ ("pied" du front) : L'évolution temporelle de $S_d^{c=0.03}$ Fig.4.22 montre deux tendances dominantes, analogues à celles rencontrées en conditions mono-carburant. Au début très élevées, les valeurs décroissent fortement jusqu'à atteindre des valeurs très inférieures à $S_L^{c=0.03}$, avant de remonter brutalement et fusionner avec $S_L^{c=0.03}$, suggérant un régime de déflagration autour de $t = 2.8\text{ms}$ (A15), $t = 3.2\text{ms}$ (B15), $t = 0.7\text{ms}$ (A60) et $t = 1.3\text{ms}$ (B60).

Une phase de propagation très lente s'étend sur une durée de l'ordre de 1.0ms et intervient entre l'AI de flamme froide (LTC) et la transition vers un régime de déflagration. Cet effet de ralentissement s'observe également pour les cas mono-carburant (section 4.1.7.2) mais de façon bien moins marquée. L'amplification de cette tendance en configuration Dual-Fuel est attribuée à l'effet de "pause" séparant l'AI de flamme froide (LTC) et chaude (HTC). Le ralentissement réactionnel survenant entre l'AI de flamme froide et chaude, est accompagné de faibles phénomènes diffusifs et réactifs Fig.4.21, et explique les faibles vitesses de déplacement $S_d^{c=0.03}$ observées.

Par ailleurs, la comparaison entre $S_d^{c=0.03}$ et $S_{AI}^{c=0.03}$ souligne la prédictivité de la théorie de Zeldovich dans certaines configurations Dual-Fuel, notamment B15 et B60 Fig.4.22b et 4.22d pour lesquels le terme réactif domine largement le terme diffusif aux premiers instants du calcul Fig.4.21b et 4.21d. La prédictivité est bien moins nette pour A15 et A60 car le terme diffusif a une amplitude comparable au terme réactif et ne peut donc pas être considéré négligeable, ce qui ne répond pas aux hypothèses de la théorie de Zeldovich.

- $c = 0.50$ ("milieu" du front) : La vitesse de déplacement du "milieu" du front $S_d^{c=0.50}$ est retardée par rapport à celle du "pied" du front $S_d^{c=0.03}$ dû aux délais séparant les AI de flamme froide (LTC) et chaude (HTC) (i.e. l'arrivée de $c = 0.50$ est ultérieure à celle de $c = 0.03$), et commence après $t = 2.3\text{ms}$ pour A15, $t = 1.8\text{ms}$ pour B15, et après $t = 0.5\text{ms}$ pour A60 et B60. Pour les cas A15 et A60 Fig.4.23a et 4.23c, $S_d^{c=0.50}$ montre immédiatement une forte proximité avec $S_L^{c=0.50}$, suggérant la transition rapide vers un régime de déflagration une fois l'AI de flamme chaude (HTC) survenue. Pour les cas B15 et B60 Fig.4.23b et 4.23d, les valeurs de $S_d^{c=0.50}$ relativement élevées (de l'ordre de 5 $S_L^{c=0.50}$), et proches de $S_{AI}^{c=0.50}$ sont observées sur une période de l'ordre de 0.5ms. Cette dynamique de propagation rapide est attribuée aux faibles gradients de réactivité dans la zone d'AI permettant la propagation prolongée d'un front d'AI avant la transition vers un régime de déflagration. En outre, $S_d^{c=0.50}$ n'admet pas de valeurs inférieures à $S_L^{c=0.50}$, contrairement à $S_d^{c=0.03}$ avec $S_L^{c=0.03}$. Tout comme pour les cas mono-carburant (section 4.1.8.3), cela est attribué à la contribution d'effets diffusifs présents au "milieu" du front ($c = 0.50$) mais absents au "pied" du front ($c = 0.03$).

Par ailleurs, B15 et B60 affichent un bon accord entre $S_d^{c=0.50}$ et $S_{AI}^{c=0.50}$ attribué à la dominance du terme réactif en début de calcul Fig.4.21b et 4.21d. De même, le critère de comparaison S_c^c vs S_{AI}^c vs S_L^c semble adapté pour déterminer le régime de combustion dominant lorsque l'avancement est de l'ordre de $c = 0.50$. La validité de ce critère est vérifiée en conditions mono-carburant (section 4.1.11) mais aussi en conditions Dual-Fuel, ce qui appuie sa validité et sa pertinence.

À noter que $S_d^{c=0.50}$ fusionne avec $S_L^{c=0.50}$ autour de $t = 2.5\text{ms}$ (A15), $t = 2.5\text{ms}$ (B15), $t = 0.5\text{ms}$ (A60), $t = 0.7\text{ms}$ (B60). Pour l'ensemble des cas Dual-Fuel, $S_d^{c=0.03}$ rejoint $S_L^{c=0.03}$ plus tardivement que $S_d^{c=0.50}$ ne rejoint $S_L^{c=0.50}$. L'établissement d'un front de flamme pré-mélangée est très progressif, et une vitesse de déplacement $S_d^{c=0.50}$ proche de $S_L^{c=0.50}$ est atteinte avant que le front de flamme pré-mélangée ne soit pleinement établi. Cela est attribué à la présence de gaz partiellement brûlés par AI en amont du front de flamme pré-mélangée Fig.4.24. Ce phénomène est également rapporté par Soriano [112]. En pratique, le "pied" du front ($c = 0.03$) suit un régime d'AI plus longtemps que le "milieu" du front ($c = 0.50$) en raison du temps d'établissement d'un profil de flamme.

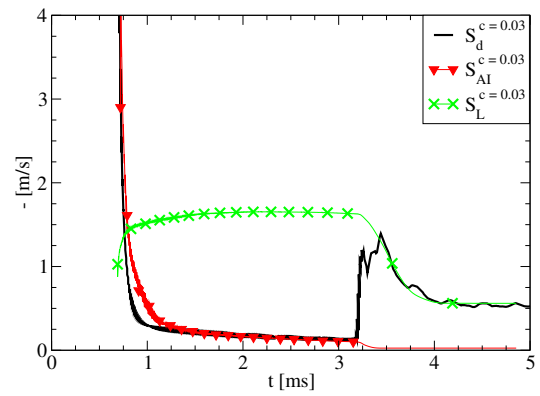
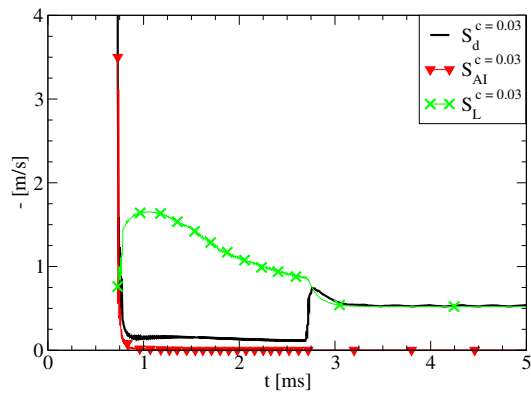
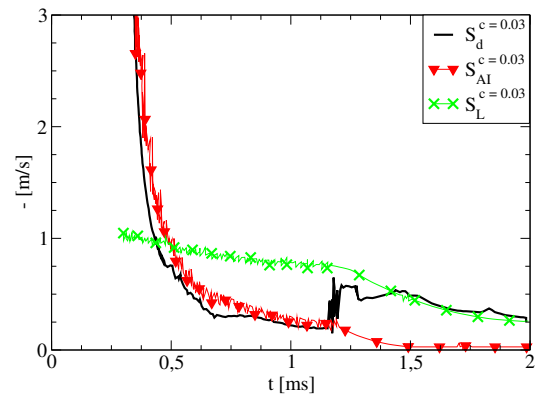
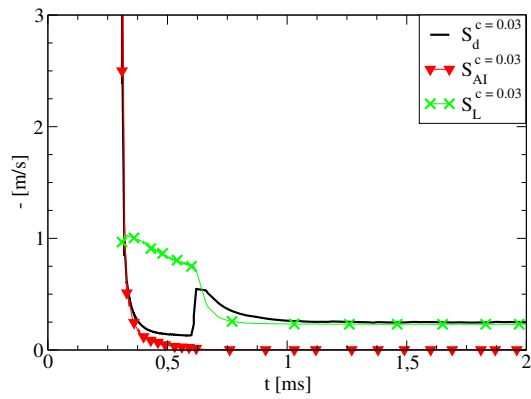
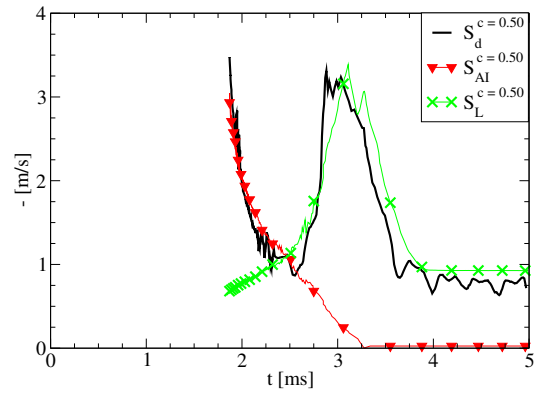
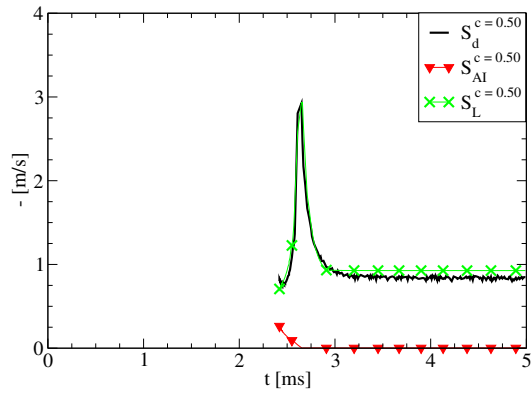
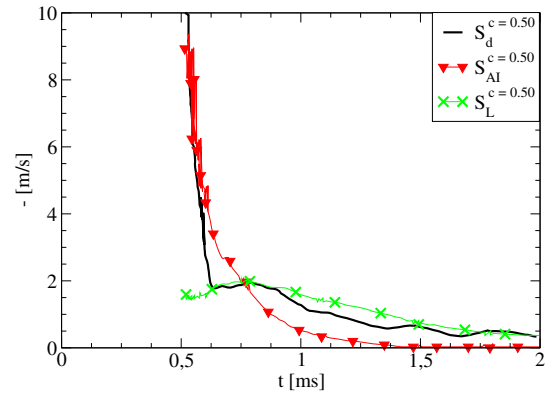
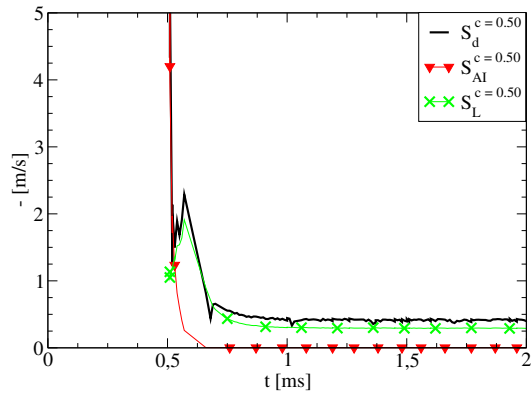
(a) Cas A15 : Transition AI→déflagration autour de $t = 2.6$ ms.(b) Cas B15 : Transition AI→déflagration autour de $t = 3.2$ ms.(c) Cas A60 : Transition AI→déflagration autour de $t = 0.7$ ms.(d) Cas B60 : Transition AI→déflagration autour de $t = 1.3$ ms.

FIGURE 4.22 – Comparaison temporelle entre la vitesse de déplacement $S_d^{c=0.03}$, la vitesse de flamme laminaire $S_L^{c=0.03}$, et la vitesse théorique d'AI $S_{AI}^{c=0.03}$ à iso-conditions locales.



(a) Cas A15 : Transition AI→déflagration autour de $t = 2.5$ ms

(b) Cas B15 : Transition AI→déflagration autour de $t = 2.5$ ms

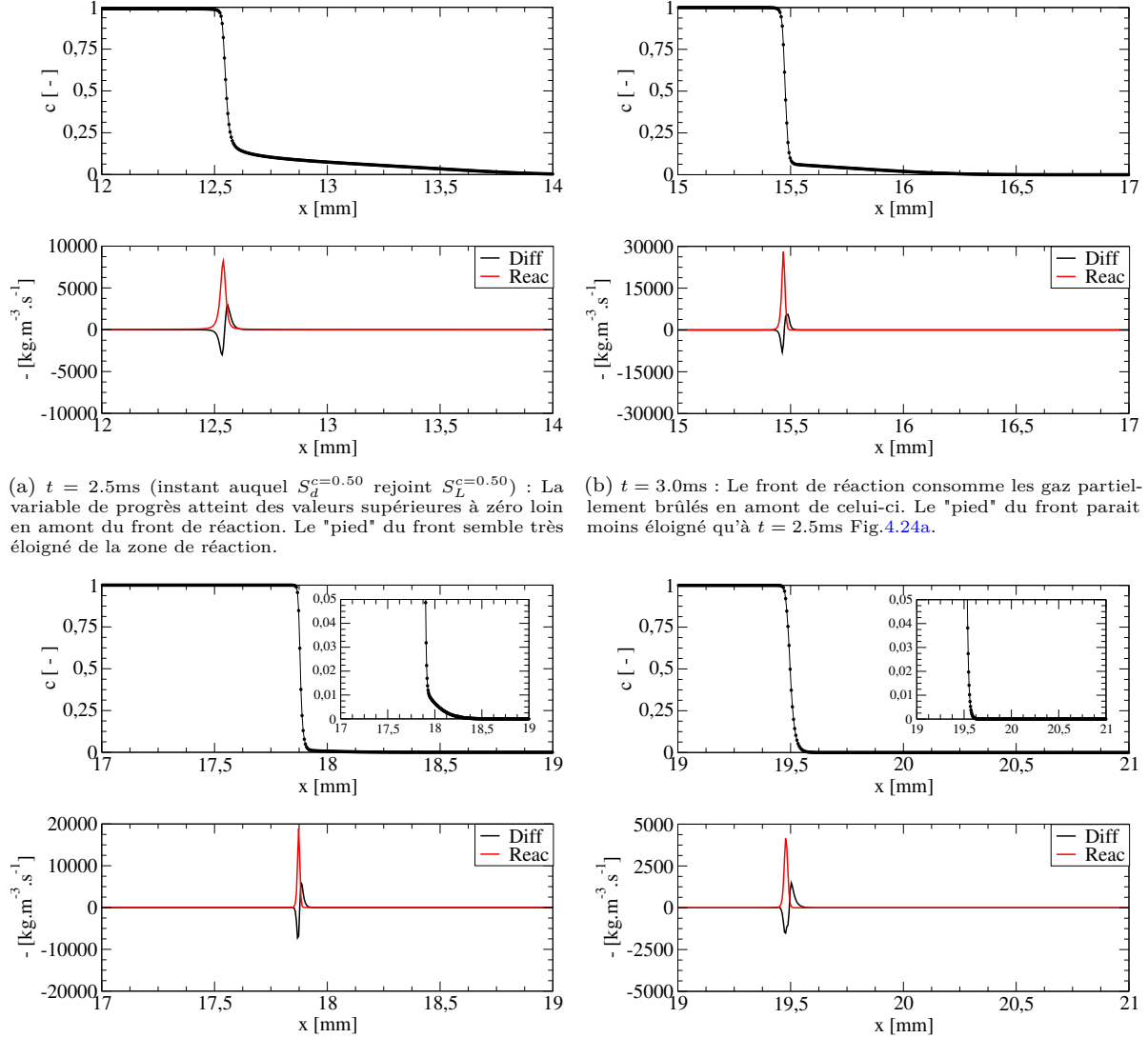


(c) Cas A60 : Transition AI→déflagration autour de $t = 0.5$ ms

(d) Cas B60 : Transition AI→déflagration autour de $t = 0.7$ ms

FIGURE 4.23 – Évolution temporelle de la vitesse de déplacement $S_d^{c=0.50}$, de la vitesse de flamme laminaire $S_L^{c=0.50}$, et de la vitesse théorique d'auto-inflammation $S_{AI}^{c=0.50}$ à iso-conditions locales.

Le profil du front de réaction évolue fortement durant la transition AI→déflagration. Ainsi, la propagation d'un front de flamme pré-mélangée à travers des gaz partiellement brûlés Fig.4.24 s'opère pour B15 entre $t = 2.5\text{ms}$ (AI de flamme chaude) jusqu'aux alentours de $t = 3.2\text{ms}$. En pratique, la brusque remontée de $S_d^{c=0.03}$ autour de $t = 3.2\text{ms}$ Fig.4.22b survient lorsque le front de réaction arrive sur l'iso-valeur $c = 0.03$ Fig.4.24c.



(a) $t = 2.5\text{ms}$ (instant auquel $S_d^{c=0.50}$ rejoint $S_L^{c=0.50}$) : La variable de progrès atteint des valeurs supérieures à zéro loin en amont du front de réaction. Le "pied" du front semble très éloigné de la zone de réaction.

(b) $t = 3.0\text{ms}$: Le front de réaction consomme les gaz partiellement brûlés en amont de celui-ci. Le "pied" du front paraît moins éloigné qu'à $t = 2.5\text{ms}$ Fig.4.24a.

(c) $t = 3.2\text{ms}$ (instant auquel $S_d^{c=0.03}$ rejoint $S_L^{c=0.03}$) : L'iso-valeur $c = 0.03$ apparaît dans le front de réaction, et non en amont de celui-ci. Des valeurs de l'ordre de $c = 0.01$ sont observées "au pied" du front de réaction, le front propage alors dans des gaz ayant très peu réagi (voir encadré).

(d) $t = 4.0\text{ms}$: Un front de flamme pré-mélangée est observé. Le front de réaction propage à travers des gaz frais - et non des gaz ayant partiellement réagi - car un avancement nul s'observe "au pied" du front (voir encadré).

FIGURE 4.24 – Cas B15 : Évolution spatiale du profil de réaction, et des termes réactifs et diffusifs pour des instants proches de la transition AI déflagration. Une propagation du front à travers des gaz partiellement brûlés est clairement visible Fig.4.24a à 4.24c.

4.2.6.5 Analyse de l'épaisseur du front de réaction

L'évolution de δ_{reac} est globalement décroissante et rejoint progressivement δ_L , ce qui indique l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée pour l'ensemble des cas Fig.4.25a. Tout comme les cas mono-carburant (section 4.1.8.1) un amincissement du front de réaction apparaît en raison des gradients d'avancement importants générés par l'AI de flamme chaude (HTC). L'épaisseur de front δ_{reac} fusionne ainsi avec l'épaisseur de flamme laminaire δ_L autour de $t = 2.5\text{ms}$ (A15), $t = 2.5\text{ms}$ (B15), $t = 0.6\text{ms}$ (A60) et $t = 0.8\text{ms}$ (B60). Les instants pour lesquels δ_{reac} fusionne avec δ_L sont semblables à ceux pour lesquels $S_d^{c=0.50}$ fusionne avec $S_L^{c=0.50}$. Les analyses de $S_d^{c=0.50}$ et δ_{reac} sont donc concordantes.

En outre, le temps d'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée semble accru pour les plus faibles gradients de réactivité. En effet, pour A15, l'AI (HTC) survient autour de $t = 2.2\text{ms}$, et la transition AI→déflagration est identifiée autour de $t = 2.5\text{ms}$, soit une durée de transition $\tau_{trans} \approx 0.3\text{ms}$. Pour B15, l'AI (HTC) et la transition AI→déflagration interviennent respectivement autour de $t = 1.5\text{ms}$, soit une durée de transition $\tau_{trans} \approx 1.0\text{ms}$. Il en va de même pour les cas A60 et B60, affichant des durées de transition AI→déflagration respectivement de l'ordre de $\tau_{trans} \approx 0.1\text{ms}$ et $\tau_{trans} \approx 0.3\text{ms}$. L'augmentation de l'étendue du gradient L_{spot} semble donc allonger significativement la durée séparant l'AI (HTC) de l'établissement d'un régime de déflagration.

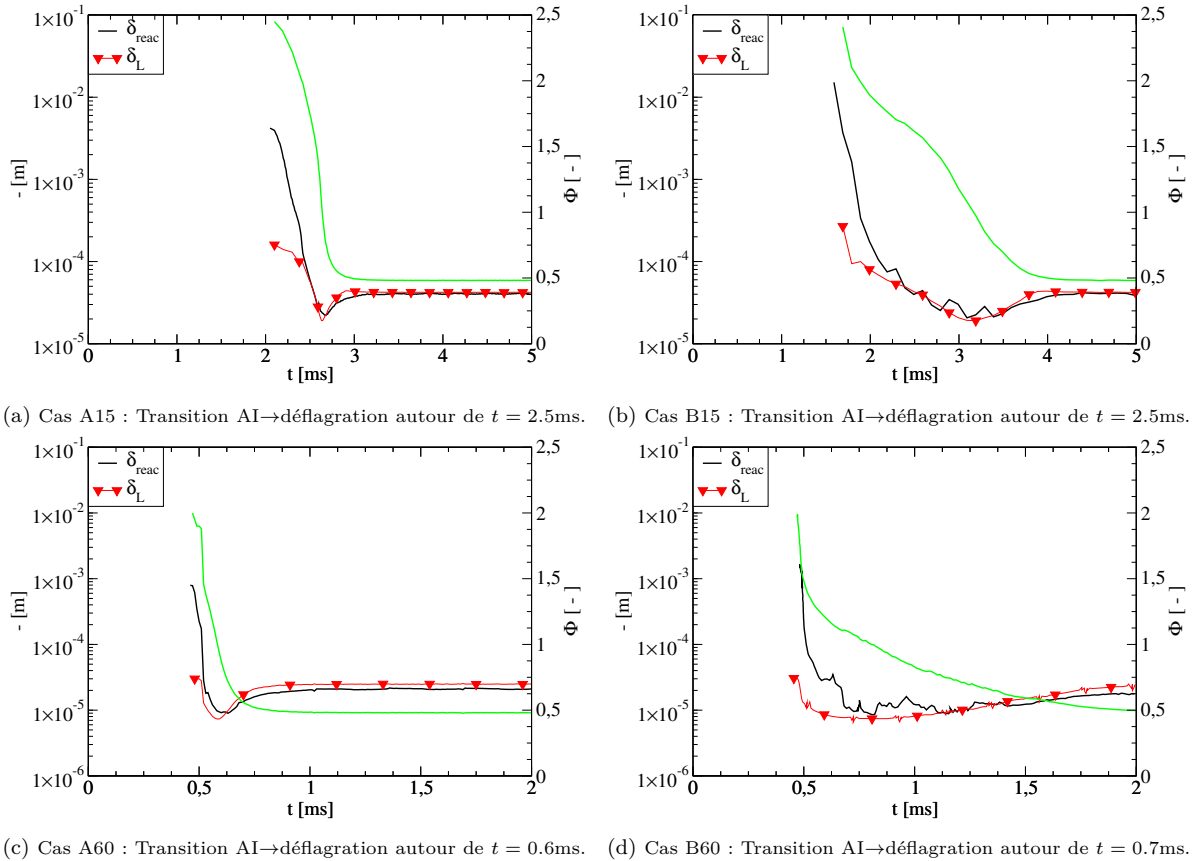


FIGURE 4.25 – Évolution temporelle de l'épaisseur du front de réaction δ_{reac} et de l'épaisseur de flamme δ_L à iso-conditions locales.

4.3 Classification des différents cas

Des variations paramétriques affectant les gradients de réactivité initiaux sont conduites dans ce chapitre, et chaque cas (mono-carburant/bi-carburant) est placé dans le diagramme de Bradley [16]. À l'exception du cas A mono-carburant ($T = 1900 \rightarrow 800K - L_{spot} = 5.0cm$) appartenant à la région de détonation en développement ("developing detonation"), l'ensemble des cas de transition AI→déflagration étudiés ici se situe dans la région de "deflagration" Fig.4.26. Cette région implique une propagation d'AI subsonique, ne générant pas ou peu d'ondes de pression, et correspondant au type de transition AI→déflagration attendu en conditions moteur Dual-Fuel. Les cas étudiés sont donc représentatifs d'une phénoménologie typique-moteur, ce qui suggère la pertinence de l'étude.

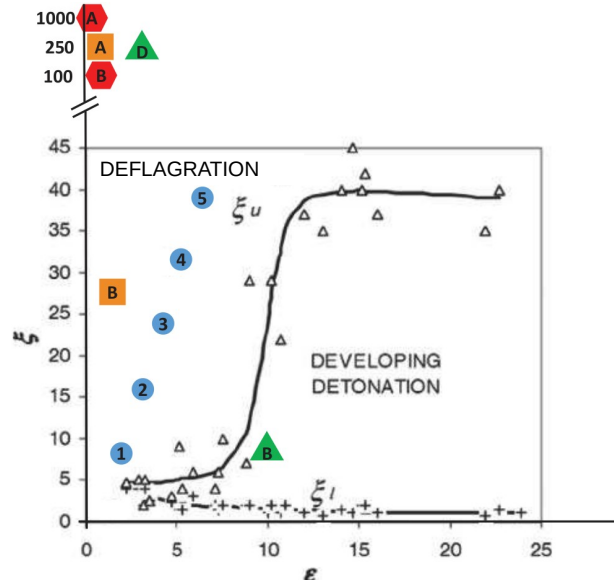


FIGURE 4.26 – Diagramme repris de Bradley *et al.* [16] représentant la phénoménologie associée à nos différentes simulations

- Rond bleu = cas mono-carburant section 4.1.10 ($T = 1600 \rightarrow 1000K$ avec L_{spot} entre 1.0cm et 5.0cm)
- ▲ Triangle vert = cas B et D mono-carburant section 4.1.7.2
- Hexagone rouge = cas *Dual-Fuel* A15 et B15
- Carré orange = cas *Dual-Fuel* A60 et B60.

4.4 Conclusions du chapitre

Au cours de ce chapitre, une étude fondamentale de la transition AI \rightarrow déflagration a été effectuée en configuration simplifiée 1D. Tout d’abord, une étude mono-carburant (air/ CH_4) est réalisée sur AVBP, et une méthodologie d’étude permettant de discriminer la propagation d’un front d’AI, d’une propagation de flamme pré-mélangée a été développée sur la base des outils proposés dans la littérature. Cette étude est notamment basée sur la vitesse de déplacement S_d^c , l’épaisseur du front de réaction δ_{reac} . La méthodologie est ensuite appliquée à des configurations 1D Dual-Fuel dans conditions thermodynamiques typiques-moteur représentatives d’applications réelles. Les tendances observées en conditions mono-carburant et bi-carburant sont semblables, et appuient la pertinence et la généralité de la méthodologie employée. Ainsi, l’ensemble des résultats révèle que :

- La stratification en réactivité joue un rôle essentiel dans la transition AI \rightarrow déflagration. En effet, il apparaît qu’une forte stratification en réactivité favorise l’établissement rapide d’un profil de flamme pré-mélangée, tandis qu’une stratification plus faible (mélange plus homogène) favorise une propagation d’AI de façon prolongée, retardant alors la transition vers un régime de déflagration.
- L’étude de la vitesse de déplacement S_d^c fournit une indication précieuse permettant de définir le régime de combustion dominant. En effet, la comparaison S_d^c vs S_{AI}^c vs S_L^c permet de mettre en évidence un régime de déflagration. Toutefois, la vitesse de déplacement est fonction de l’avancement auquel elle est évaluée. D’après l’étude présente, un avancement de l’ordre de $c = 0.50$ paraît plus adéquat pour l’identification des régimes, qu’une valeur faible telle que $c = 0.03$.
- La transition AI \rightarrow déflagration s’accompagne d’un amincissement progressif du front de réaction qui tend vers une épaisseur de flamme pré-mélangée δ_L . Ainsi, une épaisseur de front telle $\delta_{reac} \gg \delta_L$ suggère la dominance d’un régime d’AI, tandis que $\delta_{reac} \approx \delta_L$ indique un régime de déflagration. De fait, un critère basé sur l’épaisseur du front de réaction δ_{reac} fournit une information précieuse permettant de caractériser le régime de combustion dominant. L’analyse de δ_{reac} permet en outre de s’affranchir d’une valeur d’avancement prédéfinie, et semble plus robuste et universelle que l’étude de la vitesse de déplacement S_d^c dont le comportement peut varier selon la valeur d’avancement choisie, et complexifier l’analyse.
- La vitesse de déplacement S_d^c du front est comparée à la vitesse d’un front d’AI S_{AI}^c calculée à partir de la théorie de Zeldovich [136]. Pour rappel, la théorie de Zeldovich considère la propagation d’un front d’AI uniquement pilotée par les gradients de réactivité du mélange, et suppose le rôle des effets diffusifs négligeables dans la propagation du front. Ainsi, cette théorie se révèle prédictive pour les cas les moins stratifiés (gradients de réactivité inférieurs), en raison d’une forte dominance du terme réactif sur le terme diffusif. Pour les cas plus fortement stratifiés (gradients de réactivité supérieurs), la théorie de Zeldovich échoue à prédire la vitesse de déplacement du front, en raison de l’influence des effets diffusifs dans la propagation du front. En pratique, la théorie de Zeldovich est valide pour des valeurs telles que $S_{AI}^c \gg S_L^c$.

Modélisation de la transition AI→déflagration en conditions *Dual-Fuel* simplifiées

Ce chapitre étudie la capacité des modèles TKI-ECFM et TFM, présentés au chapitre 3, à représenter des phénomènes de transition AI→déflagration en configurations Dual-Fuel. Ces modèles ont été développés et testés pour traiter les régimes d'AI ou de déflagration dans des situations où ces phénomènes interagissent peu. Toutefois, leur capacité à représenter des phénomènes de transition AI→déflagration en configurations LES Dual-Fuel n'a jamais été discutée. Ainsi, les cas mono-dimensionnels A15, B15, A60, B60, analysés au chapitre 4 sont indiqués dans le chapitre présent par la dénomination "Référence", et servent alors de référence pour l'évaluation des modèles TKI-ECFM et TFM en conditions 1D Dual-Fuel simplifiées. L'approche TKI-ECFM est basée sur une tabulation de la cinétique d'AI, couplée à une modélisation de la propagation de flamme basée sur une densité de surface de flamme. L'approche TFM est basée sur une modélisation du facteur d'épaississement de flamme permettant de traiter les phénomènes de déflagration, et une modélisation du facteur d'épaississement durant l'AI et la transition AI→déflagration est proposée.

Il est souligné que les travaux présents se limitent à une modélisation de la transition AI→déflagration dans un contexte de gradients résolus, et qu'aucune modélisation de sous-maille n'est développée.

Ce chapitre fait l'objet d'un article en cours de rédaction intitulé "Modelling of auto-ignition to deflagration transition by thickened flame approach for Dual-Fuel engine combustion". Le journal visé est *Combustion and Flame*.

5.1 Description des cas d'étude

Pour rappel, les cas A15, B15, A60 et B60 repris ici impliquent une stratification en température et en composition, visant à représenter les conditions rencontrées au voisinage d'un jet pilote n-dodécane dispersé au sein d'un mélange air/ CH_4 à richesse $\phi = 0.5$ et $T = 900K$, typique de conditions moteur.

Deux niveaux de pression, ainsi que deux étendues de stratification L_{spot} sont ainsi rencontrés :

- A15 : $P = 15\text{bar}$ - $L_{spot} = 1.0\text{mm}$
- B15 : $P = 15\text{bar}$ - $L_{spot} = 10.0\text{mm}$
- A60 : $P = 60\text{bar}$ - $L_{spot} = 1.0\text{mm}$
- B60 : $P = 60\text{bar}$ - $L_{spot} = 10.0\text{mm}$

Les approches TKI-ECFM et TFM sont testées sur des maillages $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 50\mu\text{m}$. Ces niveaux de résolution sont très élevés dans le cadre de calculs moteurs mettant ordinairement en jeu des tailles de mailles de l'ordre de $200\mu\text{m}$ dans des régions fortement raffinées, comme par exemple une zone d'allumage ou le sillage d'un

spray. Toutefois, la méthode de maillages adaptatifs AMR (Adaptive Mesh Refinement) présente dans certains codes CFD dont CONVERGE [95] permet l'application d'une résolution plus fine dans des zones d'intérêt mouvantes tels que des fronts de flammes, ce qui en permet une meilleure description tout en limitant le surcoût de calcul. Les tailles de mailles de $50\mu\text{m}$ ou $100\mu\text{m}$ utilisées dans ce chapitre sont donc envisageables dans le cadre de calculs 3D LES Dual-Fuel utilisant de l'AMR. Toutefois, un maillage fixe (i.e. sans AMR) est utilisé dans les calculs présents, afin de simplifier la configuration numérique.

Dans les cas A15 à B60, ces tailles de mailles impliquent une résolution de la stratification sur un minimum de 10 cellules permettant une résolution suffisante de la stratification bi-carburant (i.e. 10 points entre Z_{min} et Z_{max}).

5.2 Constats de l'étude fondamentale 1D

L'étude fondamentale du chapitre 4 a permis de décomposer la transition AI→déflagration en trois phases :

- Premièrement, l'AI s'accompagne du passage d'un état GF à un état GB sur des durées de l'ordre de 0.1ms à 1.0ms, selon la réactivité du mélange et la présence ou non de flamme froide (LTC). L'arrivée d'un état GB ($c = 1.0$) dans la zone d'allumage marque ainsi le début d'un amincissement du front de réaction amorçant la transition AI→déflagration.
- Deuxièmement, le front de réaction progresse vers les gaz frais et subit un amincissement piloté par l'établissement progressif d'un relatif équilibre diffusion/réaction. Cet amincissement s'étend, pour tous les cas étudiés ici, sur des durées de l'ordre de 1.0ms (section 4.3) et met en jeu un régime de combustion hybride entre l'AI et la déflagration : c'est la transition AI→déflagration.
- Troisièmement, un profil de flamme pré-mélangée identifié par une épaisseur δ_L , et une vitesse de propagation caractéristique S_L s'établit. Cela s'accompagne d'un relatif-équilibre diffusion/réaction. La transition AI→déflagration est achevée.

Il est souligné que l'AI s'accompagne d'un dégagement d'énergie très intense. Dans des configurations n'impliquant pas de chimie de flamme froide, les gaz passent d'un état GF à un état GB sur des durées de l'ordre de 0.1ms. Dans des configurations impliquant des réactions de flamme froide (LTC), cette dynamique reste vraie à la différence que l'AI se déroule en deux étapes : les gaz passent alors d'un état intermédiaire de flamme froide (LTC) tel que $c \approx 0.1$, à un état GB tel que $c \approx 1.0$ sur des durées de l'ordre de 0.1ms.

Cela se traduit par une forte proximité entre : (i) les délais nécessaires pour atteindre des avancements intermédiaires représentatifs d'une flamme chaude tels que $c = 0.2 - 0.5 - 0.7$, (ii) les délais nécessaires pour atteindre un état GB tel que $c \approx 1.0$.

Cela permet de faire l'approximation $\tau_{AI}^{c=0.2-0.5-0.7} \approx \tau_{AI}^{c=1.0}$. Or, ce constat permet d'établir une hypothèse simplificatrice concernant la transition AI→déflagration.

Hypothèse n°1 : La transition AI→déflagration débute, en première approximation, avec l'arrivée d'avancements intermédiaires représentatifs de l'AI de flamme chaude (HTC), tels que $c = 0.2 - 0.5 - 0.7$. D'un point de vue de la modélisation, un seuil d'avancement tel que $c_{seuil} = 0.2 - 0.5 - 0.7$, peut donc a priori servir de critère de transition vers un régime de déflagration.

Ce type de critère a été utilisé par Robert [97] dans le cadre de l'étude du cliquetis par une approche TKI-ECFM, en configuration LES moteur. Toutefois, la validité de ce type de critère n'a pas été discutée, et nécessite donc une investigation.

5.3 Approche à chimie tabulée TKI-ECFM

L'approche TKI-ECFM reposant sur TKI pour la représentation de l'AI, et ECFM pour la propagation de flamme pré-mélangée, est testée ici. Le principe consiste à déposer une densité de surface de flamme une fois l'AI survenue, permettant au modèle ECFM d'en assurer la propagation. Toutefois, ce dépôt convient d'intervenir uniquement si les conditions d'apparition d'un régime de déflagration sont satisfaites.

5.3.1 Modélisation du dépôt de surface de flamme

Les cas 1D présents ne faisant intervenir aucune interaction flamme/turbulence, une densité de surface de flamme laminaire est déposée via le terme source Eq.(5.1).

$$\bar{\omega}_{\Sigma} = \max\left(0, \frac{|\nabla \tilde{c}| - \bar{\Sigma}}{dt}\right) \quad (5.1)$$

Sur la base de l'hypothèse n°1, un critère de dépôt de surface de flamme basé sur un avancement d'AI $\tilde{c}_{AI}^{seuil} = 0.5$ est supposé capable de générer un dépôt de surface de flamme cohérent avec le début de la transition AI→déflagration. En outre, un critère $\tilde{c}_{AI}^{seuil} = 0.5$ est supposé empêcher un dépôt de surface de flamme trop précoce, dû à des gradients d'avancement issus de la flamme froide (LTC) comme décrit en section 3.4.3.2. De plus, chaque cas comporte un calcul sans dépôt de surface de flamme (TKI seul, i.e. sans ECFM) permettant de distinguer la contribution des deux modèles dans la transition AI→déflagration.

5.3.2 Évaluation des approches TKI et TKI-ECFM

5.3.2.1 Description de l'AI

AI de flamme froide (LTC) : Pour les cas A15, B15, A60, B60, l'AI de flamme froide (LTC) survient respectivement autour de $t = 0.8\text{ms}$, $t = 0.8\text{ms}$, $t = 0.4\text{ms}$ et $t = 0.4\text{ms}$ à la fois pour les calculs de référence et pour les calculs TKI et TKI-ECFM Fig.5.2a à 5.2d. Cela suggère une capacité de l'approche TKI à représenter l'apparition des réactions de flamme froide dans les conditions présentes. En outre, pour de faibles avancements rencontrés durant les réactions de flamme froide (i.e. $c \approx 0.1$), le comportement des calculs TKI et TKI-ECFM est identique. Cela confirme que le critère d'avancement \tilde{c}_{AI}^{seuil} prohibe le dépôt de surface de flamme pour des avancements inférieurs à $\tilde{c}_{AI}^{seuil} = 0.5$, et suggère le bon fonctionnement du modèle. Pour l'ensemble des calculs TKI et TKI-ECFM, la propagation du front de flamme froide génère des oscillations de chaleur attribuées à des effets de sous-résolution. Ainsi, pour l'ensemble des cas, le front de flamme froide semble se propager "cellule par cellule", par processus d'inflammations successives. Le taux de dégagement de chaleur associé à la propagation de flamme froide (LTC) des calculs TKI et TKI-ECFM est semblable à celui des calculs de référence, à l'exception du cas A15 Fig.5.2a. Cela suggère donc que la propagation de flamme froide assurée par TKI est correctement représentée, exception faite de A15, malgré des effets de sous-résolution notables.

AI de flamme chaude (HTC) : Pour les cas B15, A60, et B60, l'AI de flamme chaude (HTC) survient respectivement autour de $t = 1.7\text{ms}$, $t = 0.5\text{ms}$ et $t = 0.5\text{ms}$ à la fois pour les calculs de référence et pour les calculs TKI et TKI-ECFM. Cela suggère donc une capacité satisfaisante du modèle TKI à représenter l'AI (HTC) pour les cas B15, A60, B60. Cependant, pour le cas A15, l'AI (HTC) survient autour de $t = 1.2\text{ms}$ pour les calculs TKI et TKI-ECFM contre $t = 2.2\text{ms}$ pour le calcul de référence. Dans un contexte moteur, cet écart de délais de 1.0ms représente un décalage de l'ordre de 10 degrés vilebrequin, rendant l'utilisation de TKI-ECFM peu prédictive dans des conditions thermodynamiques similaires à celles de A15.

En effet, le modèle TKI repose sur une tabulation des taux de réaction calculés à partir de réacteurs 0D à pression constante, sans effets diffusifs entre ces réacteurs 0D. L'absence de prise en compte des phénomènes diffusifs suppose alors de faibles niveaux de stratification (i.e. effets diffusifs négligeables). Or pour A15, le terme diffusif atteint une amplitude comparable au terme réactif durant l'AI, et joue donc un rôle clef (chapitre 3, section 4.2.6.3). L'avance à l'AI (HTC) pour les calculs TKI et TKI-ECFM est alors attribuée à l'absence de prise en compte des phénomènes diffusifs jouant un rôle clef dans le comportement de A15.

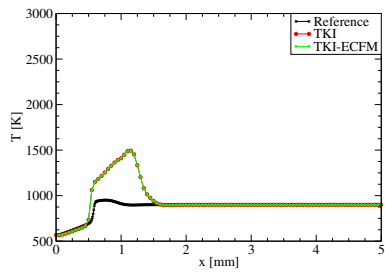
Par contraposée, la prédictivité des calculs TKI et TKI-ECFM pour les cas B15, A60, B60 est attribuée à la dominance du terme réactif durant l'AI (chapitre 3, section 4.2.6.3). Le flux diffusif jouant un rôle négligeable dans les cas B15, A60, et B60 n'influence donc pas significativement l'AI. L'allumage se comporte alors comme un ensemble de réacteurs 0D indépendants, et répond aux hypothèses de la théorie de Zeldovich [136], ce qui favorise la validité du modèle TKI.

5.3.2.2 Description de la flamme pré-mélangée

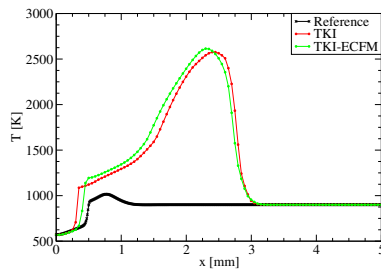
Calculs TKI : Pour les calculs TKI, la propagation du front de flamme pré-mélangée est assurée par un modèle d'AI, par définition inadapté à traiter un tel régime. Le modèle TKI implique une variable d'avancement d'AI \tilde{c}_{AI} calculée à partir de la composition locale. De fait, la variable \tilde{c}_{AI} est soumise aux mêmes effets diffusifs que les espèces à partir desquelles elle est calculée. En pratique, l'interface GF/GB associée au front de réaction entraîne une diffusion de \tilde{c}_{AI} vers les gaz frais. Cette diffusion de \tilde{c}_{AI} crée un avancement "artificiel" côté GF, découlant de phénomènes de diffusion, et non de phénomènes de réaction. Or, l'avancement \tilde{c}_{AI} sert de donnée d'entrée au terme source $\dot{\omega}_c^{TKI}$ (au même titre que la pression, température, la composition GF). Ainsi, le modèle TKI va lire dans la table des taux de réactions $\dot{\omega}_c^{TKI}$ associés à des valeurs d'avancement \tilde{c}_{AI} intermédiaires liées à des réactions de flamme froide/chaude (LTC/HTC). Ces taux de réactions peuvent alors, si la réactivité du mélange le permet, entretenir la propagation d'un front de réaction, par diffusion de \tilde{c}_{AI} .

Pour le cas A15, la réactivité du mélange ne permet pas d'entretenir la propagation d'un front de réaction. En effet, après $t = 2.5\text{ms}$ le dégagement de chaleur chute Fig.5.2a, la température moyenne du domaine stagne Fig.5.3a, la propagation du front de réaction apparaît stoppée Fig.5.1a à 5.1c. Pour le cas B15, la réactivité du mélange permet toutefois la propagation d'une flamme pré-mélangée artificiellement entretenue par le modèle d'AI TKI. En effet, un taux de dégagement de chaleur comparable à celui du calcul de référence apparaît après l'AI Fig.5.2b. Cette propagation se remarque plus spécialement côté pilote (branche riche, à gauche), où le front de réaction dépasse sensiblement le front de référence Fig.5.1d à 5.1f. Inversement, côté méthane (branche pauvre, à droite), le front de réaction accuse un certain retard par rapport à la référence suggérant que la réactivité du mélange ne permet pas une propagation par auto-inflamations successives. Pour les cas A60 Fig.5.1g à 5.1i et B60 Fig.5.1j à 5.1l, la réactivité du mélange permet une propagation de flamme pré-mélangée artificiellement entretenue par TKI, à la fois côté pilote et côté méthane (respectivement à gauche et à droite). Cette propagation entraîne une surestimation du dégagement de chaleur Fig.5.2c et 5.2d, et donc de la température moyenne du domaine Fig.5.3c et 5.3d.

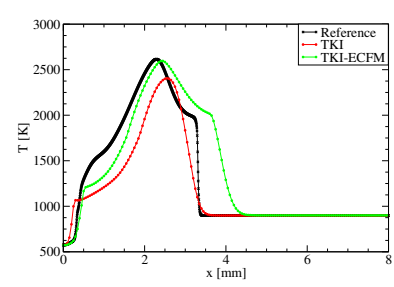
Calculs TKI-ECFM : Pour les calculs TKI-ECFM, le dépôt de surface de flamme survient simultanément à l'AI de flamme chaude (HTC), en raison du critère d'avancement $\tilde{c}_{AI}^{seuil} = 0.5$. Ainsi, pour les cas A15, B15, A60, B60, le dépôt de surface de flamme survient respectivement autour de $t = 1.5\text{ms}$, $t = 2.0\text{ms}$, $t = 0.6\text{ms}$, $t = 0.6\text{ms}$. Le terme $\dot{\omega}_c^{ECFM}$ dépasse le terme $\dot{\omega}_c^{TKI}$ rapidement, une fois l'AI survenue Fig.5.4a à 5.4d, à l'exception de B15 Fig.5.4b affichant une opération conjointe de TKI et ECFM entre $t = 2.0\text{ms}$ et $t = 4.0\text{ms}$, de même que pour B60 Fig.5.4d entre $t = 1.5\text{ms}$ et $t = 3.0\text{ms}$, car la réactivité locale favorise une propagation d'AI par TKI. La combustion des gaz par ECFM semble alors prohiber la propagation du front de réaction par TKI, observée dans les calculs avec TKI seul. Cela est attribué à un phénomène de compétition entre TKI et ECFM, et s'explique par le phénomène suivant : les gaz (ou une partie de ceux-ci) sont consommés (du moins en partie) par ECFM avant que ceux-ci n'aient eu le temps de s'auto-enflammer, ce qui limite la propagation d'un front entretenu par TKI.



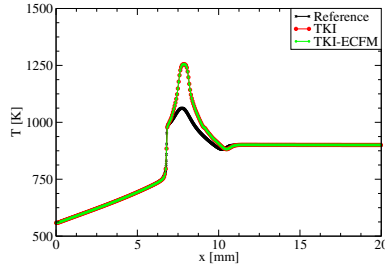
(a) Cas A15 - $t = 1.5\text{ms}$: Début AI de flamme chaude (HTC) des calculs TKI et TKI-ECFM.



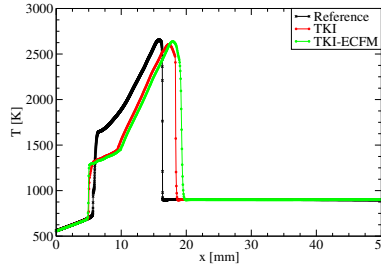
(b) Cas A15 - $t = 2.0\text{ms}$: Début AI de flamme chaude (HTC) du calcul de référence.



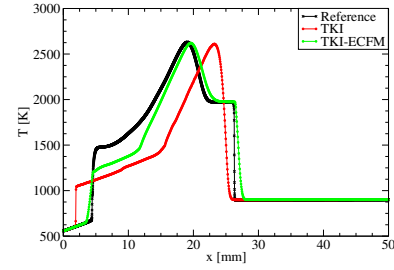
(c) Cas A15 - $t = 3.0\text{ms}$: Propa côté méthane.



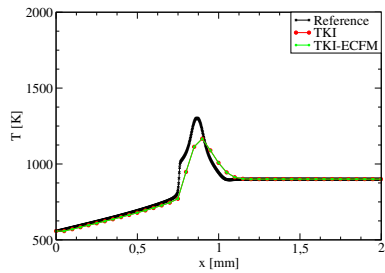
(d) Cas B15 - $t = 1.6\text{ms}$: Début AI de flamme chaude (HTC).



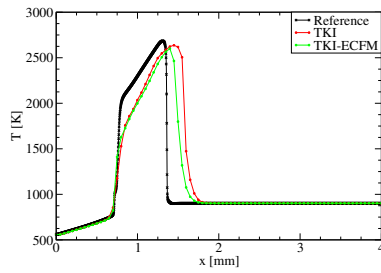
(e) Cas B15 - $t = 3.2\text{ms}$: Début propa ECFM



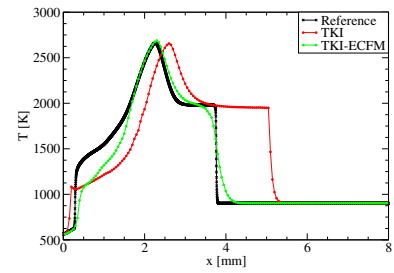
(f) Cas B15 - $t = 8.0\text{ms}$: Propa côté méthane



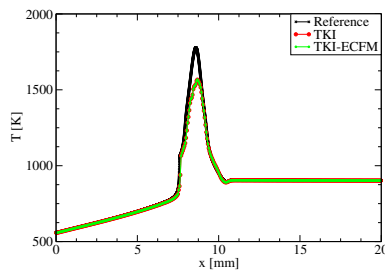
(g) Cas A60 - $t = 0.5\text{ms}$: Début AI de flamme chaude (HTC).



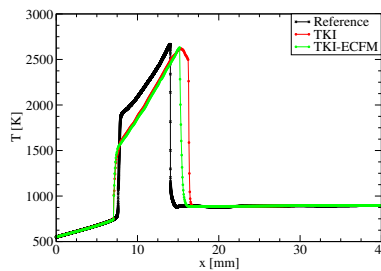
(h) Cas A60 - $t = 0.6\text{ms}$: Début propa ECFM



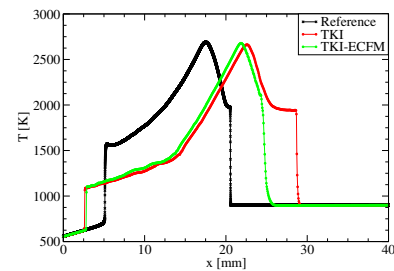
(i) Cas A60 - $t = 3.0\text{ms}$: Propa côté méthane



(j) Cas B60 - $t = 0.5\text{ms}$: Début AI de flamme chaude (HTC).



(k) Cas B60 - $t = 0.7\text{ms}$: Début propa ECFM



(l) Cas B60 - $t = 3.0\text{ms}$: Propa côté méthane

FIGURE 5.1 – Comparaison des profils de température à différents instants clés, entre le calcul de référence et les calculs TKI et TKI-ECFM. Une forte avance à l'AI de flamme chaude (HTC) est notée pour les approches TKI et TKI-ECFM pour A15. Pour B15, A60, B60, l'AI (HTC) survient simultanément aux calculs de référence. Pour B60 Fig.5.11, la propagation est trop rapide côté pilote (à gauche), effet attribué à une propagation essentiellement assurée par TKI, en raison de la forte réactivité locale.

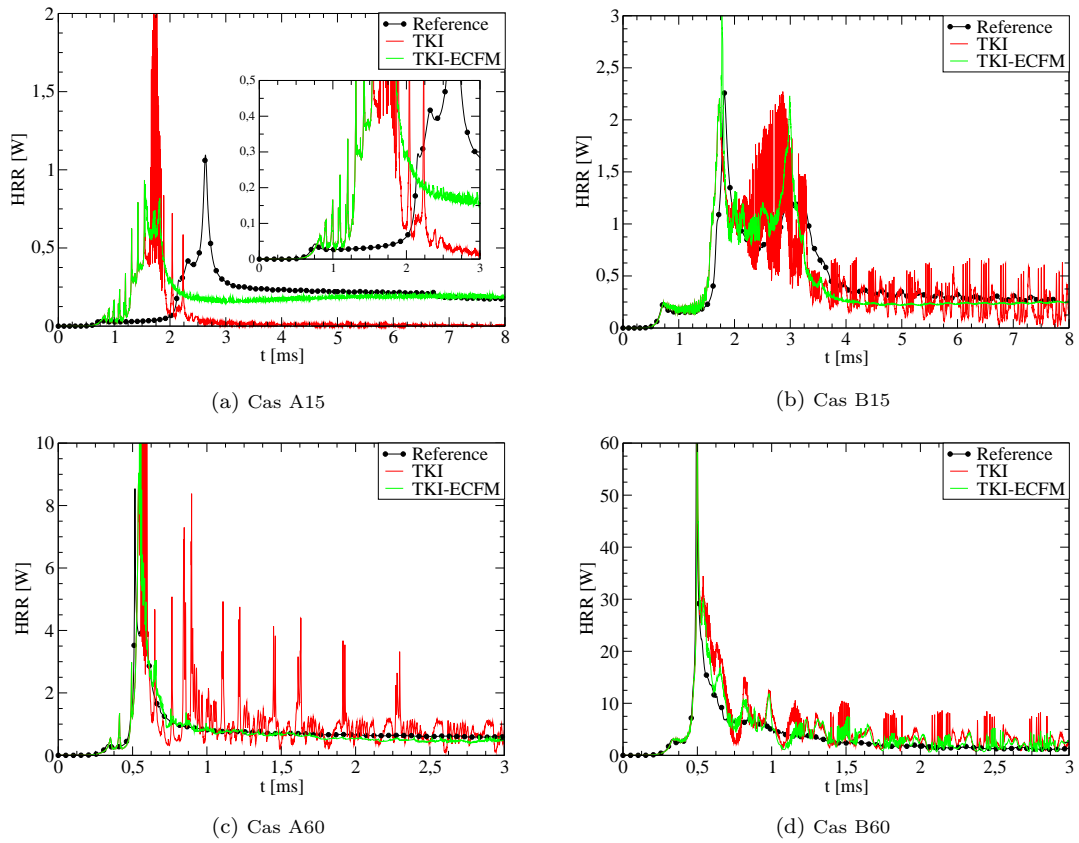


FIGURE 5.2 – Comparaison en dégagement de chaleur entre les calculs de référence et les calculs TKI et TKI-ECFM sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$. Les délais d'AI des calculs de référence sont reproduits par les calculs TKI et TKI-ECFM pour B15 à B60. Toutefois, pour le cas A15, les calculs TKI et TKI-ECFM affichent une AI fortement anticipée par rapport au calcul de référence ($\tau_{AI} \approx 1.2\text{ms}$ contre $\tau_{AI} \approx 2.2\text{ms}$)

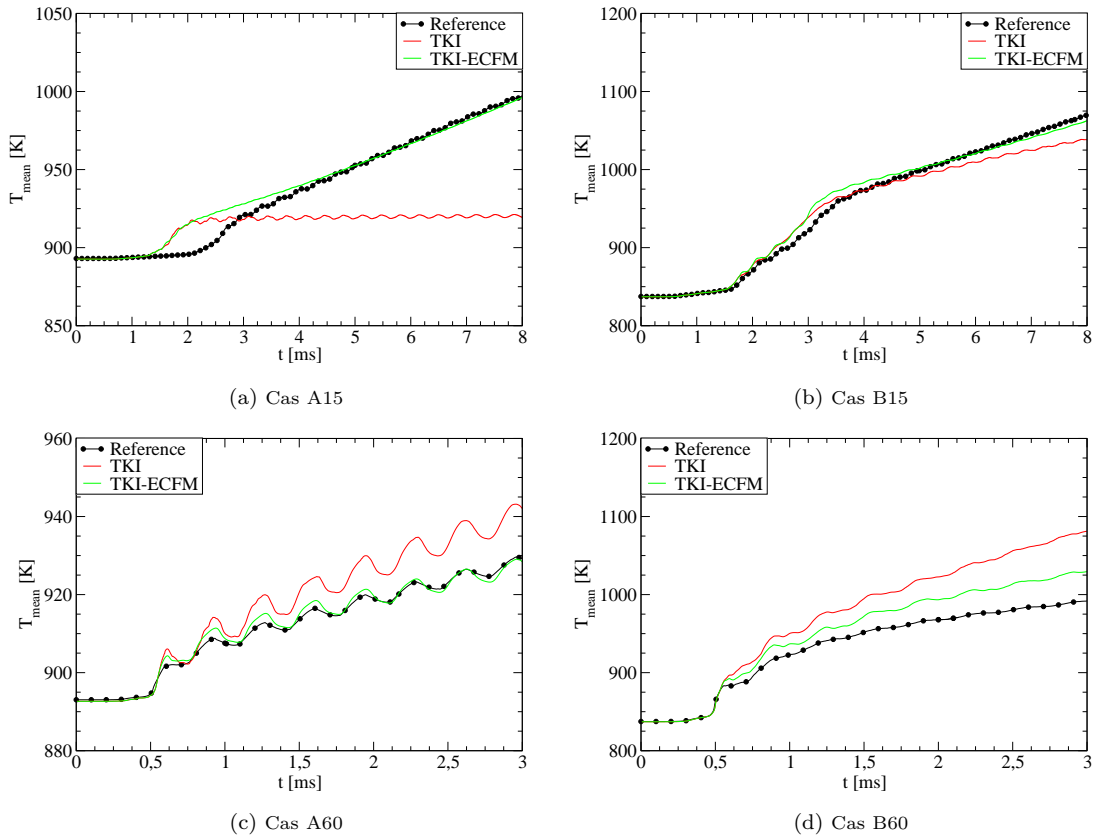


FIGURE 5.3 – Comparaison en température moyenne entre les calculs de référence et les calculs TKI et TKI-ECFM sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$. Pour B15, A60 et B60, la température moyenne des calculs TKI-ECFM est proche de celles des calculs de référence. Pour A15, une avance à l’allumage significative est notée pour les calculs TKI et TKI-ECFM.

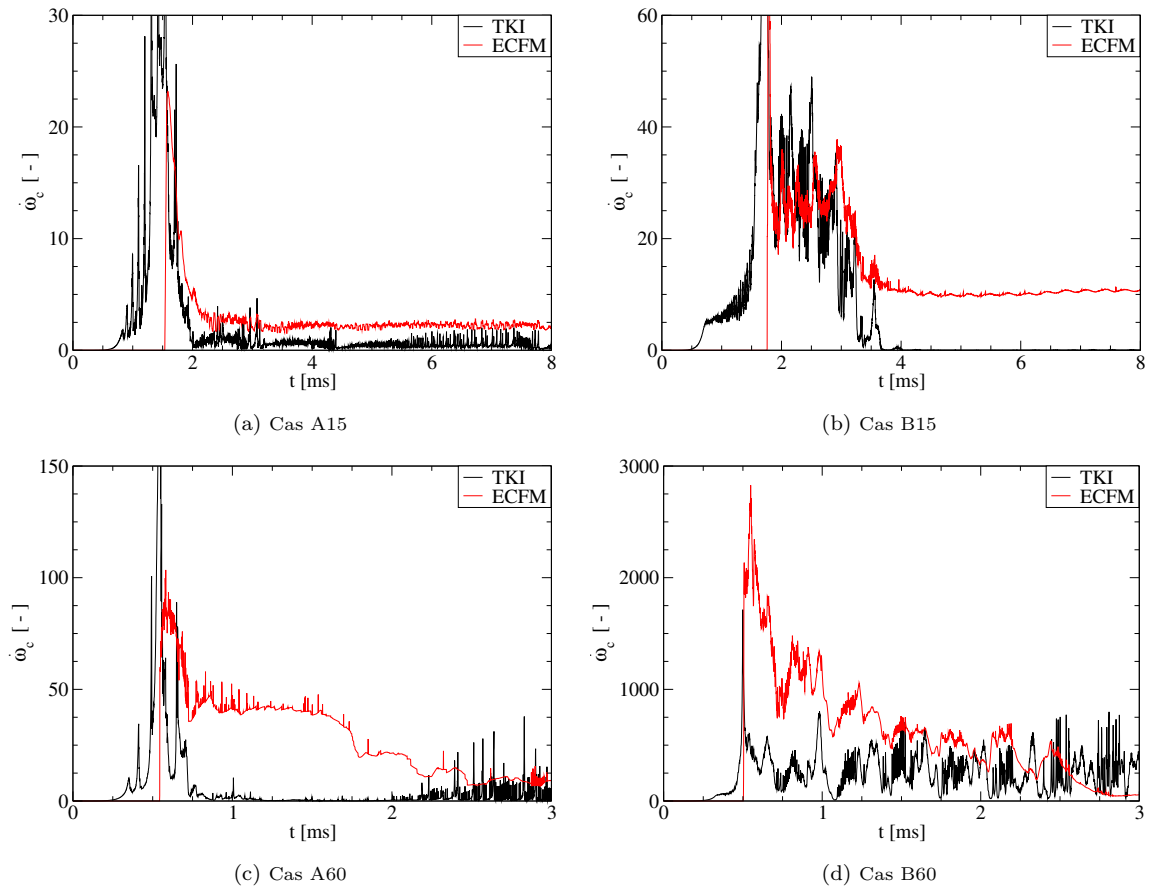


FIGURE 5.4 – Calculs TKI-ECFM sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$. Comparaison des termes sources $\dot{\omega}_c^{TKI}$ et $\dot{\omega}_c^{ECFM}$ intégrés sur tout le domaine. Globalement, ECFM domine rapidement TKI après l'AI, à l'exception du cas B60 (effets de propagation par TKI côté pilote).

5.3.3 Conclusions de l'approche TKI-ECFM

L'évaluation des modèles TKI et TKI-ECFM a montré deux tendances fondamentales :

- Premièrement, le modèle de chimie tabulée TKI permet une représentation fine de l'allumage par AI dans des conditions impliquant des gradients de délais d'AI modérés et une dominance du terme réactif sur le terme diffusif, pouvant alors être négligé. Toutefois, pour des gradients de réactivité plus forts notamment rencontrés dans le cas A15, les effets diffusifs jouent un rôle essentiel durant l'AI, et ne peuvent plus être négligés. De fait, l'approche TKI basée sur une tabulation 0D des taux de réaction est incapable de prendre en compte ces termes diffusifs, et montre donc ses limites lorsque ceux-ci atteignent une amplitude comparable à celle du terme réactif. La prise en compte de ces phénomènes de diffusion paraît donc essentielle à la bonne description de l'AI en conditions fortement stratifiées (effets de dissipation scalaire, section 4.2.6.3).
- Deuxièmement, le couplage avec TKI-ECFM permet une représentation correcte des phénomènes de transition AI→déflagration, par l'utilisation d'un critère "simple" reposant sur une condition d'avancement $\tilde{c}_{AI}^{seuil} = 0.5$ représentative d'une AI de flamme chaude. Ce dernier permet le dépôt d'une surface de flamme à des instants cohérents avec le début de la transition vers un régime de déflagration (hypothèse n°1).

Les limites des conditions d'applicabilité de TKI-ECFM pour représenter les phénomènes de transition AI→déflagration en configurations Dual-Fuel, sont donc principalement liées aux limitations d'une approche tabulée en 0D pour représenter l'AI dans des conditions fortement stratifiées. En effet, certaines conditions thermodynamiques mettant en jeu de forts gradients de délais d'AI sont sensibles aux phénomènes diffusifs (effets de dissipation scalaire, section 4.2.6.3), et peuvent mettre en défaut l'approche TKI-ECFM. La transition vers un régime de déflagration est alors mal représentée. Cette limitation restreint alors le spectre de conditions moteurs dans lequel l'approche TKI-ECFM peut être considérée prédictive.

Dans la suite de ce travail, une approche basée sur la résolution directe de la chimie est évaluée, et sa capacité à représenter l'influence des effets du taux de dissipation sur une AI fortement stratifiée (cas A15) est notamment discutée.

5.4 Approche *no-model* à chimie résolue : Potentiels et difficultés

L'approche TKI a montré son incapacité à représenter une AI stratifiée Dual-Fuel dans des conditions faisant intervenir des effets de dissipation scalaire résolus (cas A15, Fig.5.2a et 5.3a). L'approche *no-model* utilisée pour les calculs de référence sur un maillage de niveau DNS (chapitre 4), est testée ici de façon à évaluer sa capacité à représenter une AI stratifiée sur un maillage LES, et notamment prendre en compte les effets de dissipation scalaire résolus mettant en défaut l'approche tabulée TKI.

Un maillage de niveau LES ne permet pas la résolution d'un front de flamme pré-mélangée par une approche *no-model*, du moins dans des conditions typiques-moteur. Il est donc souligné que la prédictivité des calculs *no-model* est évaluée pour le régime d'AI uniquement (section 5.4.1). Toutefois, le comportement du front de flamme pré-mélangée subséquent à l'AI est tout de même décrit de façon à quantifier l'erreur induite par une résolution insuffisante (section 5.4.2). Ces calculs constituent en réalité des tests préliminaires en vue de l'utilisation du modèle TFM pour traiter le régime de déflagration.

5.4.1 Description de l'AI

Les calculs *no-model* montrent que l'AI (HTC), mise évidence par un pic principal de dégagement de chaleur, s'opère aux mêmes instants que pour les calculs de référence, et ce pour les cas A15 à B60 Fig.5.5 et 5.6. L'approche *no-model* apparaît donc capable de représenter une AI stratifiée Dual-Fuel lorsque que les gradients de mélange sont suffisamment résolus (i.e. a minima 10 points entre Z_{min} et Z_{max}), et également de prendre en compte des effets de dissipation scalaire résolus. Cette caractéristique constitue alors un avantage significatif par rapport à l'approche tabulée TKI, totalement incapable de tenir compte des effets de dissipation scalaire résolu (section 5.3.2.1).

Pour rappel, et d'après l'étude fondamentale 1D du chapitre 4, un noyau d'AI met en jeu des gradients d'avancement beaucoup moins raides qu'une flamme pré-mélangée ($\delta_{reac} \gg \delta_L$ en AI, section 4.1.7 et 4.2.6). La résolution spatiale requise pour la description d'un noyau d'AI est donc moins fine que pour une flamme pré-mélangée, à iso-conditions thermodynamiques. La prédictivité en AI des calculs *no-model* présents est donc attribuée à cette caractéristique, malgré un niveau de résolution fortement réduit par rapport aux calculs de référence.

En outre, la chimie de flamme froide (LTC), mise en évidence par un dégagement de chaleur de faible intensité précédant le pic d'AI de flamme chaude, s'accompagne d'oscillations de dégagement de chaleur, traduisant une propagation "cellule par cellule". Cette dynamique est semblable à celle d'une flamme pré-mélangée sous-réolue (section 5.4.2), ce qui suggère que la propagation d'un front de flamme froide est sensible au niveau de résolution au même titre qu'un front de flamme chaude. Toutefois, contrairement à une flamme chaude, la sous-résolution du front de flamme froide (LTC) ne semble pas induire de biais significatif sur sa dynamique puisque le dégagement de chaleur moyen est semblable à celui des calculs de référence (particulièrement visible pour B15 Fig.5.5b et B60 Fig.5.5d). Contrairement à un front de flamme pré-mélangée, la flamme froide (LTC) implique des gradients d'avancement de faible amplitude (du fait d'avancements faibles), dont la sous-résolution ne semble pas entraver la propagation et le dégagement de chaleur associé.

5.4.2 Description de la propagation de flamme pré-mélangée

Les maillages de niveau DNS des calculs de référence permettent une résolution du front de flamme sur 5 à 10 points, tandis que les maillages de niveau LES utilisés ici sont 10 à 50 fois plus grossiers. Une forte sous-résolution du front de flamme en découle, ce qui introduit un biais dans la description du régime de déflagration. La propagation du front de flamme des cas A15 à B60 (démarrant globalement après de pic principal de dégagement de chaleur) s'effectue de façon instable "cellule par cellule", en témoignent les fortes oscillations de dégagement de chaleur. Cette dynamique est accompagnée d'une mauvaise estimation du dégagement de chaleur moyen. Pour les cas A15 Fig.5.5a et 5.6a, la sous-résolution du front de flamme se manifeste par une sous-estimation du dégagement de chaleur, inversement aux cas A60 Fig.5.5c et 5.6c et B60 Fig.5.5d et 5.6d. Pour le cas B15, le dégagement de

chaleur est proche de celui du calcul de référence Fig.5.5b et 5.6b. Le front de flamme chaude (HTC) étant fortement sous-résolu, cette proximité avec la référence est donc fortuite, et ne fournit pas une preuve de sa bonne description.

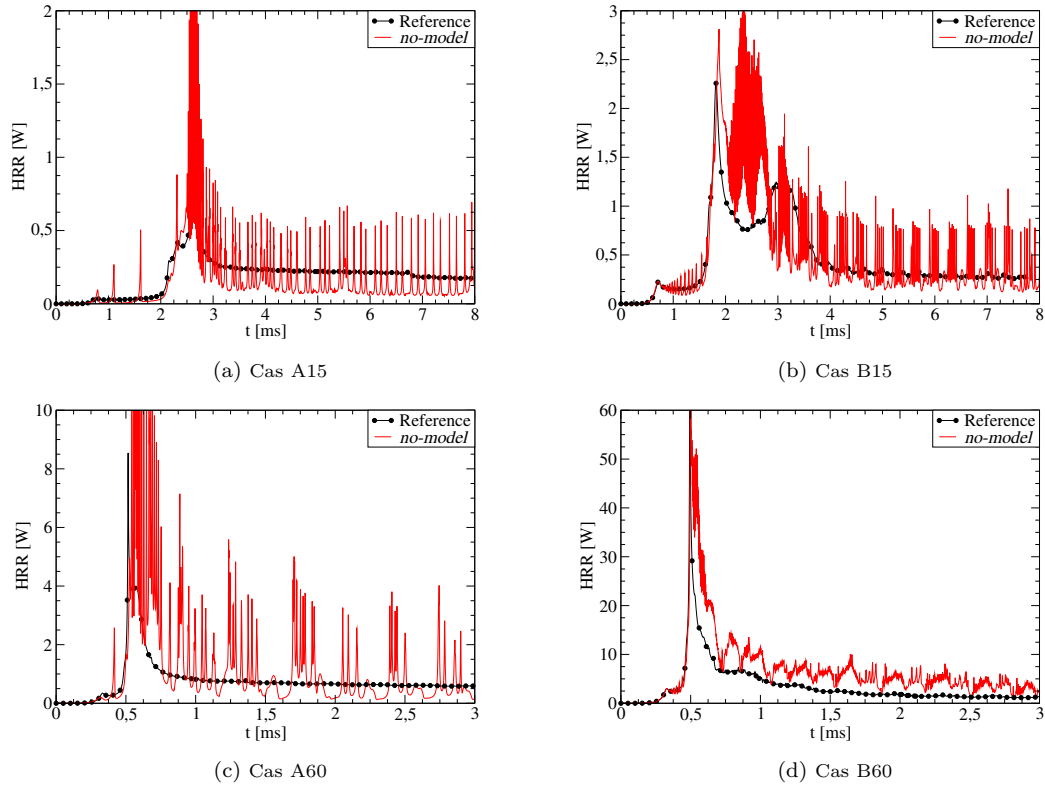


FIGURE 5.5 – Comparaison en dégagement de chaleur entre les calculs de référence et les calculs *no-model* sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ pour A15 à B60. Les oscillations résultent d'une sous-résolution du front de réaction.

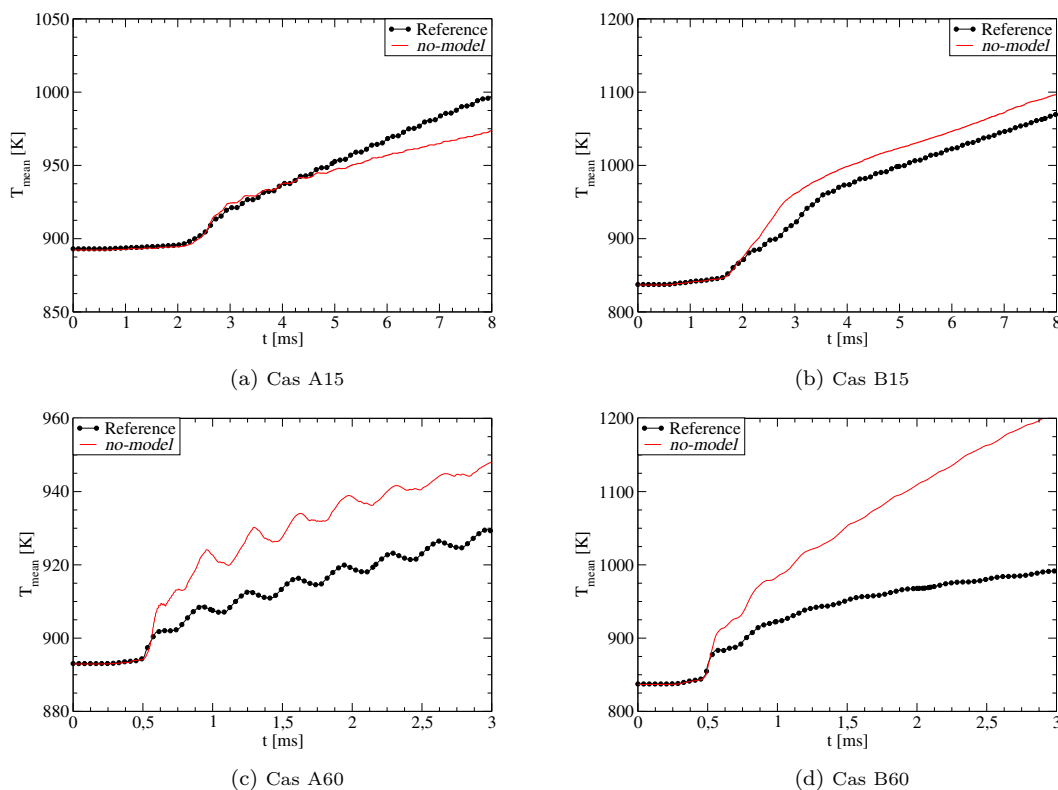


FIGURE 5.6 – Comparaison en température moyenne entre les calculs de référence et les calculs *no-model* sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ pour A15 à B60. Des ondes de pression accompagnent l’AI et entraînent des fluctuations de température moyenne, plus spécialement pour A60 et B60.

5.4.3 Conclusions de l’approche *no-model* à chimie résolue

Dans cette section, une approche *no-model* identique à celle utilisée dans les calculs de référence Dual-Fuel (chapitre 3), à été testée sur un maillage LES. Les délais d’AI (LTC et HTC) des calculs de référence sont reproduits pour l’ensemble des cas. De même, la propagation de flamme froide (LTC) apparaît correctement représentée, malgré une évolution instable "cellule par cellule", attribuée à la sous-résolution du phénomène. Cela suggère que l’approche *no-model* est peu sensible aux variations de résolution pour l’AI, et confirme sa capacité à représenter un régime d’AI, et des effets de dissipation scalaire résolus (cas A15), dès lors que la zone de mélange est suffisamment résolue (i.e. a minima 10 points entre Z_{min} et Z_{max}). La prise en compte de ces effets de dissipation scalaire résolus est un avantage significatif par rapport à l’approche tabulée TKI, et offre des perspectives encourageantes en vue d’applications LES 3D.

Toutefois, la sous-résolution du front de flamme pré-mélangée subséquent à l’AI, entraîne une mauvaise estimation de sa vitesse de propagation et du dégagement de chaleur associé (jusqu’à une surestimation d’un facteur 3 pour B60). Cela prohibe donc l’utilisation de l’approche *no-model* pour des calculs LES 3D Dual-Fuel. Ces conclusions justifient donc la nécessité d’introduire un modèle permettant de traiter la propagation d’une flamme pré-mélangée sur un maillage de niveau LES. Le modèle TFM est un candidat plausible puisqu’il permet de traiter la propagation d’une flamme au moyen d’une résolution directe de la chimie. La suite de ce travail est donc axée sur la modélisation de la transition AI→déflagration par une approche de type TFM.

5.5 Approche à modèle de flamme épaissie (TFM - *Thickened Flame Model*)

5.5.1 Paramétrisation du modèle TFM sur une flamme canonique 1D

Le modèle TFM est conçu pour représenter un régime de propagation de flamme par l'intermédiaire d'un facteur d'épaississement permettant la résolution du front sur un maillage LES. Avant toute utilisation en configuration Dual-Fuel stratifiée, une étape de validation/réglage des paramètres sur une configuration simplifiée de flamme laminaire 1D, homogène en composition et température est effectuée. Les conditions thermodynamiques imposées pour ces tests correspondent au pré-mélange air/ CH_4 des cas A15 et B15, à savoir $\phi = 0.5$, $P = 15$ bar, $T_{GF} = 900K$. Cela permet une validation du modèle et des paramètres dans les conditions thermodynamiques représentatives du pré-mélange air/ CH_4 des cas A15 à B60.

Ainsi, des paramètres $n_{res} = 5$ et $n_{res} = 10$, impliquant respectivement des résolutions du front sur 5 et 10 points, sont testés, et deux couples α_{cold} et α_{hot} conditionnant la relaxation de \hat{S} (et donc \mathcal{F}) vers 0 en amont/aval du front (section 3.3.3.4) sont testés. Cela permet d'étudier la sensibilité du front de flamme à la résolution et à l'épaississement dans les zones de pré-chauffage et post-flamme.

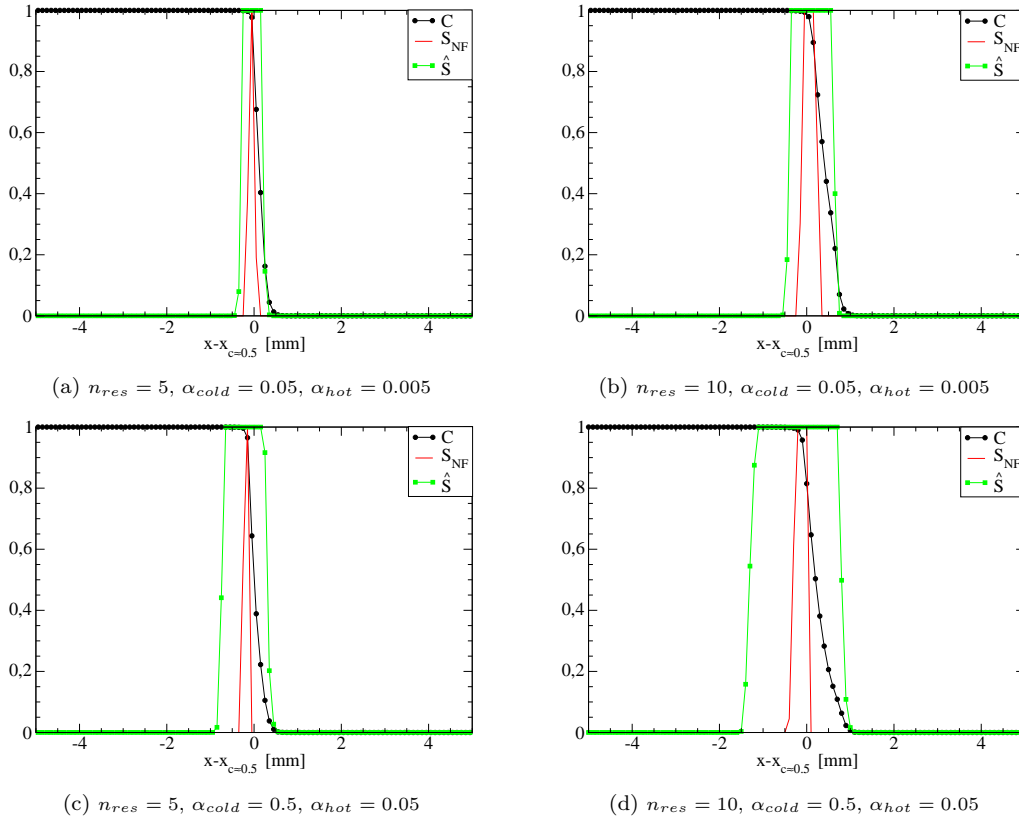


FIGURE 5.7 – Sensibilité du modèle TFM aux paramètres α_{cold} , α_{hot} , et n_{res} sur une flamme de méthane 1D, $\phi = 0.5$, $P = 15$ bar, $T_{GF} = 900K$ (conditions des cas A15 et B15, côté méthane). L'abscisse est normalisée autour d'un avancement $c = 0.5$, et les symboles représentent des points de maillage. Le sensor de réaction S_{NF} s'active pour des avancements élevés (*i.e.* autour de $c = 0.8$), mettant en jeu un dégagement d'énergie plus important. Le sensor transporté \hat{S} est diffusé de part et d'autre du front, englobant alors l'ensemble du profil.

Les valeurs $\alpha_{cold/hot}$ les plus faibles induisent des temps de relaxation $\psi \rightarrow 0$ plus courts, et tendent à amincir la région où \hat{S} prend des valeurs proches de 1.0. En conséquence, le facteur d'épaississement s'applique à une zone plus mince. En effet, les champs instantanés montrent que pour le couple de valeurs $\alpha_{cold/hot}$ faibles Fig.5.7a et 5.7b, \hat{S} ne prend la valeur de 1.0 que pour des avancements supérieurs à $c \approx 0.3$, tandis que pour des valeurs $\alpha_{cold/hot}$ plus élevées Fig.5.7c et 5.7d, \hat{S} tend vers 1.0 à partir d'avancements beaucoup plus faibles tels que $c \approx 0.1$, et ce indépendamment de la valeur de n_{res} . Identiquement, \hat{S} prend la valeur de 1.0 sur une plus grande étendue de la zone post-flamme pour le couple de valeurs $\alpha_{cold/hot}$ élevées. Les valeurs $\alpha_{cold/hot}$ plus élevées induisent un

"englobement" du front de flamme sensiblement plus large dû à une relaxation de ψ vers 0 plus lente. Cela se traduit en pratique par l'application du facteur d'épaississement dans les zones de pré-chauffage et post-flamme, et une meilleure résolution des phénomènes de diffusion/réaction qui s'y déroulent.

Toutefois, aucune influence significative des paramètres $\alpha_{cold/hot}$ et n_{res} sur le dégagement de chaleur n'est remarquée. En effet, des écarts de moins de 3% entre le calcul de référence et les calculs TFM sont notés. Cela traduit une certaine permissivité quant au choix des paramètres $\alpha_{cold/hot}$ et n_{res} , dès lors que la résolution du front est suffisante. Afin de s'affranchir d'éventuels problèmes de sous-résolution et garantir un nombre de points suffisant dans le front de flamme, et ce dans toutes les conditions thermodynamiques rencontrées dans les cas A15 à B60, les paramètres adoptés dans la suite sont, sauf mention contraire, les suivants Tab.5.8 :

Paramètre	Rôle	Valeur
α_{cold}	Relax $\hat{S} \rightarrow 0$ côté GF	0.5
α_{hot}	Relax $\hat{S} \rightarrow 0$ côté GB	0.05
β	Sensibilité \mathcal{S}_{NF}	4
n_{res}	Résolution du front	10

FIGURE 5.8 – Tableau récapitulant les paramètres utilisés dans les calculs TFM effectués dans la suite.

5.5.2 Évaluation du modèle TFM-M0

L'approche à chimie résolue no-model testée section 5.4 montre une capacité prometteuse à représenter l'AI sur un maillage de niveau LES, lorsque la zone de mélange est suffisamment résolue. L'approche no-model ne permet cependant pas la propagation de flamme sur un maillage LES, contrairement à une approche de type TFM. La dénomination TFM-M0 désigne le modèle TFM standard développé par Jaravel [48] sous le nom de TFLES (Thickened Flame for Large Eddy Simulation). TFM-M0 est testé ici sur les cas A15 à B60 de façon à évaluer sa capacité à traiter des phénomènes de transition AI→déflagration sur un maillage de niveau LES.

Dans cette section ainsi que les suivantes, les notations $\mathcal{F}_{target|st}$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}}$, $\mathcal{F}_{target|CH_4}$ font respectivement référence aux facteurs d'épaississement à la stœchiométrie, à la fraction de mélange la plus réactive Z_{MR} (i.e. là où apparaît l'AI), et dans le pré-mélange air/méthane.

L'étude de TFM-M0 est basée sur le taux de dégagement de chaleur Fig.5.15, et la température moyenne du domaine Fig.5.16. De façon globale, et comme rapporté par les travaux de Misdariis [73], le facteur d'épaississement inhibe la réactivité du mélange et entraîne un allongement des délais d'AI. Ainsi, l'apparition de l'AI de flamme chaude survient avec un retard très significatif, particulièrement pour les cas A15 Fig.5.15a et A60 Fig.5.15c impliquant une stratification plus raide. La surestimation des délais d'AI est d'un facteur 2 pour B15 Fig.5.15b et B60 Fig.5.15d, un facteur 4 pour A15 Fig.5.15a, un facteur 5 pour A60 Fig.5.15c. Le modèle TFM-M0 fournissant des résultats très différents des calculs de référence, il n'est pas discuté davantage.

Dans les sections suivantes, différentes approches de modélisation de la transition AI→déflagration en contexte TFM ont été développées et testées. Les modifications par rapport à TFM-M0 sont systématiquement mentionnées pour chaque modèle discuté ultérieurement.

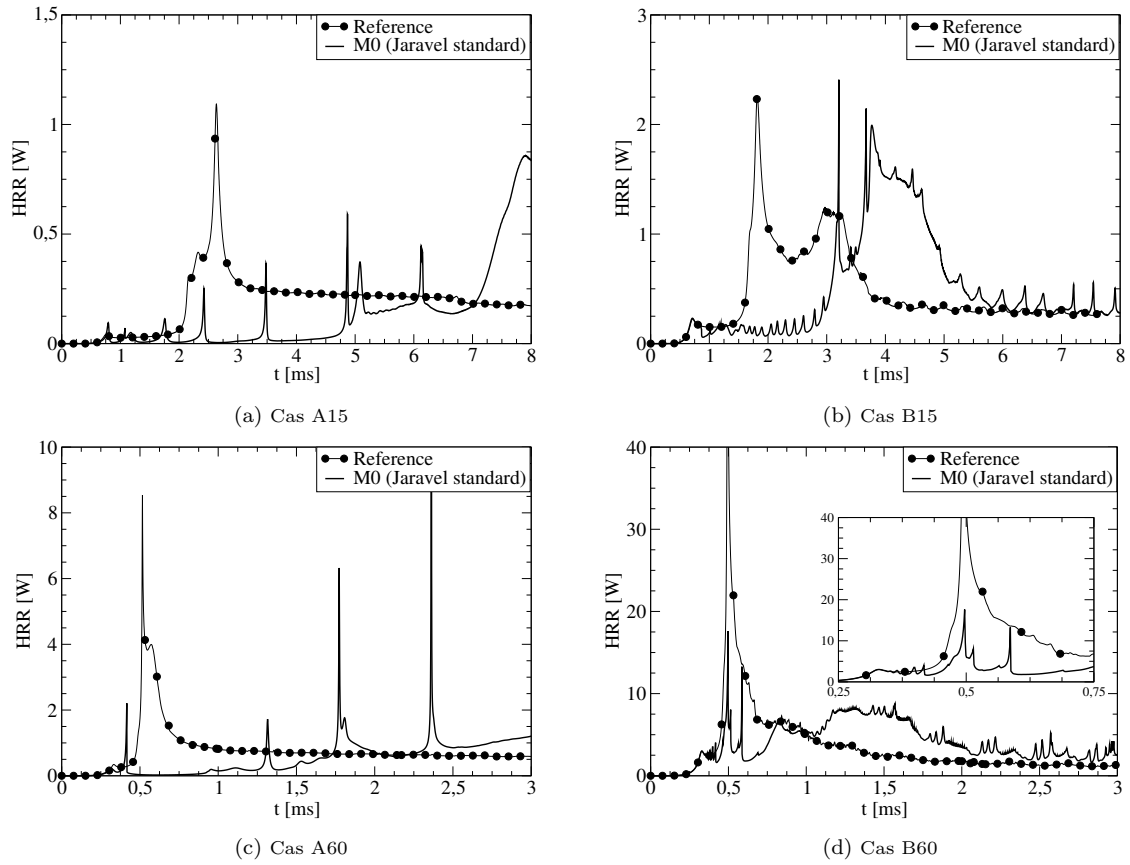


FIGURE 5.9 – Comparaison en dégagement de chaleur entre les calculs de référence et les calculs TFM-M0 sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$. Les délais d'AI sont fortement allongés par M0.

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target|st} = 50$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 30$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 20$.

Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target|st} = 120$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 70$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 60$.

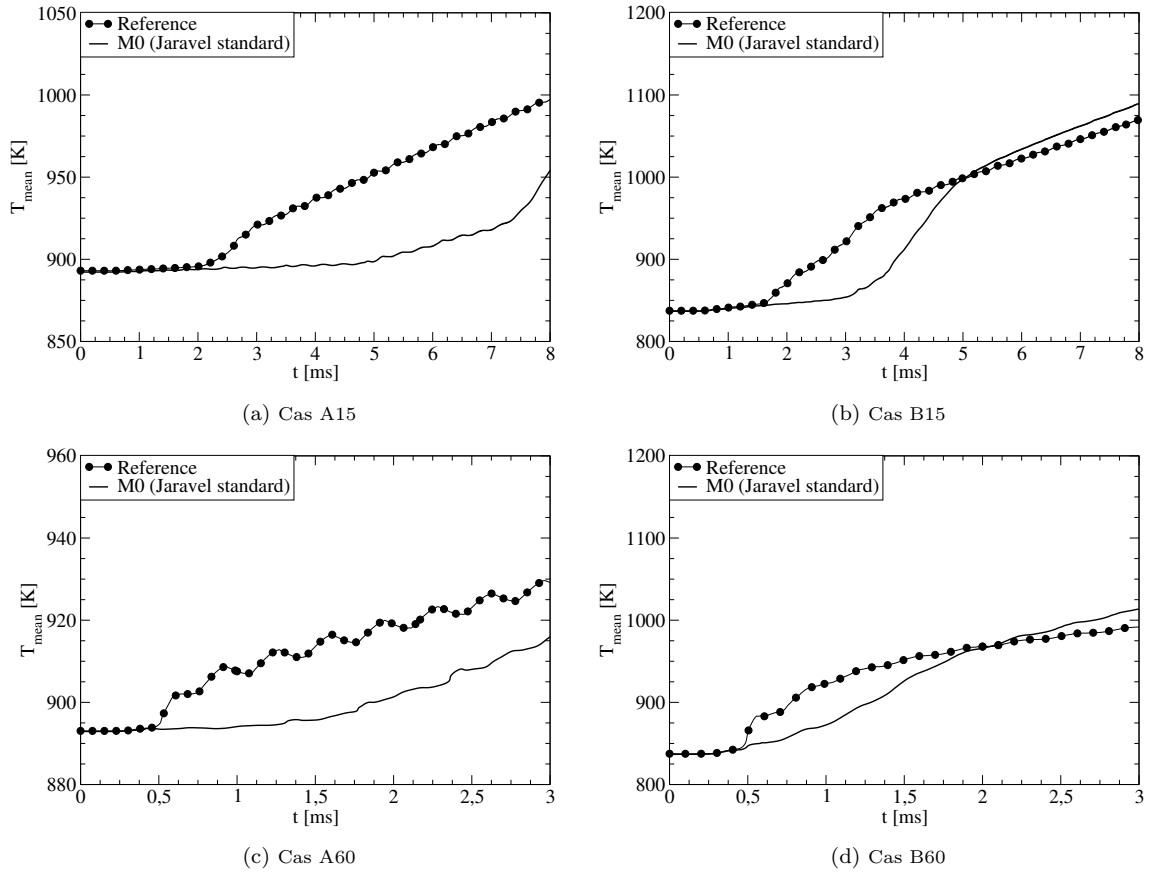


FIGURE 5.10 – Comparaison en température moyenne entre les calculs de référence et les calculs TFM-M0 sur un maillage $\Delta x = 100\mu\text{m}$. L'évolution de la température des calculs TFM-M0 est très différente, en raison du retard à l'AI. Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target|st} = 50$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 30$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 20$. Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target|st} = 120$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 70$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 60$.

5.5.3 Formulation d'un modèle portant sur le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} : TFM-M1

Le modèle TFM-M0 est incapable de distinguer un noyau d'AI d'un élément de surface de flamme. De fait, les réactions d'AI peuvent être détectées par le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} , et entraîner l'application d'un facteur d'épaississement dans un noyau d'AI, y compris durant des réactions de flamme froide (LTC). Il en résulte les retards à l'AI rapportés en section 5.5.2.

D'après l'hypothèse n°1 (section 5.2), la transition AI→déflagration débute lorsqu'un avancement intermédiaire représentatif de réactions de flamme chaude apparaît, tel que $c = 0.2 - 0.5 - 0.7$. Ainsi, un critère d'avancement c_{seuil} est ajouté au modèle TFM-M0 : il en résulte le modèle TFM-M1. Ce conditionnement permet donc de retarder l'application du facteur d'épaississement à l'arrivée d'un avancement marquant le début de la transition AI→déflagration (hypothèse n°1), et donc de limiter l'influence du modèle sur l'AI (i.e. limiter l'allongement des délais d'AI). Pour des valeurs inférieures à c_{seuil} , un épaississement $\mathcal{F} = 1$ est donc appliqué. Pour des valeurs supérieures à c_{seuil} , le facteur d'épaississement nominal \mathcal{F}_{target} est appliqué et permet la résolution du front de flamme initié par AI, sur un maillage de niveau LES.

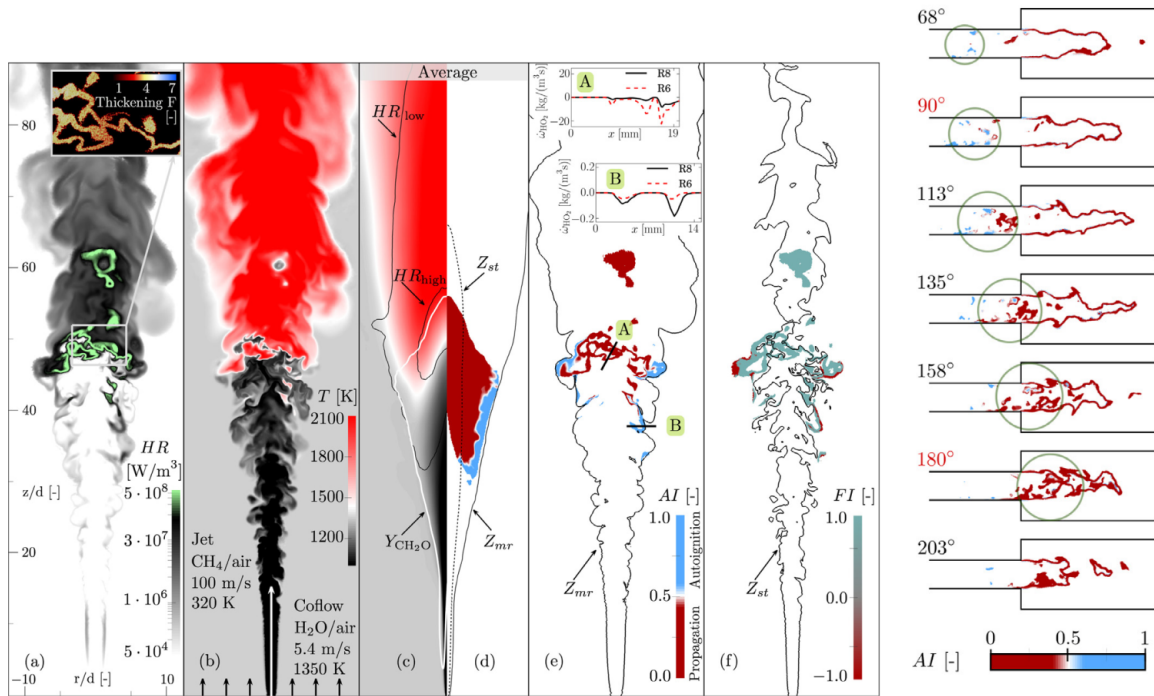
Une stratégie similaire visant à éliminer l'allongement des délais d'AI imputable au facteur d'épaississement a déjà été discutée en contexte LES moteur, moyennant des critères analogues à c_{seuil} :

- Une condition de température T_{seuil} retardant l'application du facteur \mathcal{F} à un état proche-GB est utilisée par Misdariis [73], et appliquée dans le cadre d'une étude du cliquetis en configuration LES moteur. Des

tests de principe en condition 1D montrent l'apport d'une condition de température par rapport au modèle standard. Toutefois, aucune validation extensive n'est réalisée.

- Un seuil d'avancement $c_{seuil} > 0.8$ est appliqué par Malé [66] dans le cadre d'une étude de l'allumage par pré-chambre en configuration LES moteur. La validité de l'approche n'est cependant pas vérifiée.

Dans un contexte d'application académique, un critère visant à discriminer les régimes d'AI et de propagation de flamme est proposé par Schulz et al. [107] et appliqué au brûleur swirlé Cabra (Cambridge) [20], et à un brûleur séquentiel (ETH Zurich) [108] utilisant tous deux un mélange air/méthane. D'après Gkagkas et al. [37], le chemin réactionnel, et plus particulièrement les réactions de création/consommation de l'espèce de HO_2 mises en jeu par la combustion air/méthane, diffère sensiblement selon le régime AI/déflagration.



(a) Application du critère AI à un calcul LES du jet Cabra [20]. Repris de Schulz *et al.* [107].

(b) Application du critère AI à un calcul LES de brûleur séquentiel de l'ETH Zurich. Repris de Schulz *et al.* [108].

FIGURE 5.11 – Illustration de l'indice AI construit pour discriminer un noyau d'AI d'un élément de surface de flamme.

Ainsi la création de HO_2 est principalement pilotée par les réactions :



La consommation de HO_2 est principalement pilotée par les réactions :



En régime d'AI, Gkagkas et al. [37] rapportent que la création de HO_2 s'effectue essentiellement par la réaction (R8), et peu par la réaction (R6). De fait, un indice de régime noté AI et basé sur la comparaison des réactions (R6) et (R8) est développé. Lorsque la condition $AI > 0.5$ est remplie, le facteur d'épaississement prend la valeur

de $\mathcal{F} = 1.0$ Fig.5.11a et 5.11b. Dans le cas inverse, le facteur d'épaississement prend sa valeur nominale \mathcal{F}_{target} , définie par les conditions locales. Les auteurs rapportent une bonne proximité avec les données expérimentales, ce qui suggère la prédictivité de l'approche développée. Le critère AI s'exprime comme Eq.(5.2) :

$$AI = \left| \frac{\dot{\omega}_{HO_2}^{(R8)}}{\dot{\omega}_{HO_2}^{(R8)} + \dot{\omega}_{HO_2}^{(R6)}} \right| \quad (5.2)$$

En outre, Terashima et al. [119] proposent un critère de détection de front de flamme basé sur la dérivée locale de température, le modèle LTF (Localized Thickened Flame). D'après les auteurs, ce modèle est également capable de discriminer un noyau d'AI d'un profil de flamme. Une configuration 1D présentant une propagation de flamme initiée par AI atteste de la capacité de ce modèle à reproduire le comportement du calcul de référence Fig.5.12.

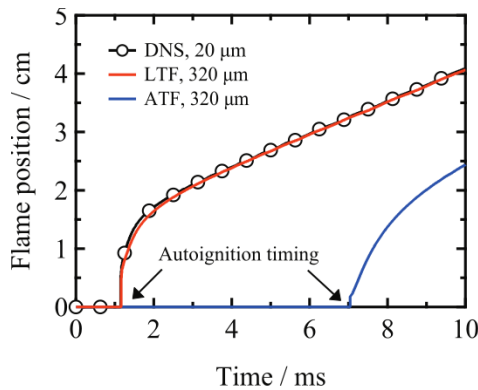


FIGURE 5.12 – Validation du modèle LTF développé par Terashima *et al.* [119] sur une configuration 1D impliquant une transition AI→déflagration. ATF représente le modèle de flamme épaissie sans la modélisation permettant de discriminer un noyau d'AI d'un front de flamme.

Toutefois, l'utilisation des critères d'identification AI/déflagration n'a, à la connaissance de l'auteur, jamais fait l'objet d'une validation dans un contexte de transition AI→déflagration Dual-Fuel.

Ainsi, l'indice AI utilisé par Schulz et al. [107, 108] est spécifique à la combustion du méthane et nécessite que le mécanisme réactionnel reproduise le chemin réactionnel de l'espèce HO_2 . Cela ajoute une contrainte supplémentaire sur l'utilisation d'un mécanisme réduit, outre le fait que les grandeurs macroscopiques (délais d'AI, vitesse de flamme...) soient respectées. De plus, l'approche est testée dans des conditions impliquant des facteurs d'épaississement de l'ordre de $\mathcal{F}_{target} = 5 - 10$, donc très éloignés de valeurs typiques-moteur $\mathcal{F}_{target} = 50 - 150$.

Par ailleurs, Terashima et al. [119] proposent un indice de régime basé sur la dérivée d'ordre 4 de la température. Bien que cette approche soit validée sur une transition AI→déflagration 1D Fig.5.12, les facteurs d'épaississement mis en jeu ($\mathcal{F}_{target} = 5 - 10$ également) ne permettent pas d'assurer la validité de l'indice de régime dans des conditions typiques moteur, impliquant des facteurs d'épaississement bien supérieurs. Pour rappel, l'étude fondamentale 1D (chapitre 4) montre que la transition AI→déflagration s'accompagne d'un amincissement progressif du front de réaction. La discrimination AI/déflagration dans des conditions mettant en jeu des facteurs d'épaississement élevés est donc potentiellement très délicate puisque les épaisseurs d'un front d'AI et d'une flamme épaissie (tout comme les gradients de température utilisés dans le modèle pour la ségrégation AI/déflagration,) peuvent a priori être comparables.

La généralité des approches proposées par Schulz et al. [107, 108] et Terashima et al. [119] paraît donc discutable. Ainsi, pour des raisons de simplicité et de généralité, la suite des travaux s'organise autour de critères d'avancement. Dans TFM-M1, un critère c_{seuil} est appliqué au senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} , et trois valeurs d'avancement sont testées : 0.2, 0.5 et 0.7. Le fonctionnement du modèle TFM-M1 est décrit dans l'algorithme 3.

5.5.4 Évaluation du modèle TFM-M1

Tout d'abord, l'influence du critère d'avancement c_{seuil} sur la propagation d'une flamme pré-mélangée épaissie est étudiée Fig.5.13. Le modèle TFM-M1 reprend ainsi les propriétés essentielles du modèle TFM-M0 : le facteur d'épaississement englobe l'ensemble du front de flamme (i.e. zone de réaction+pré-chauffage). Le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} ne s'activant qu'à partir d'avancements supérieurs $c \approx 0.8$, le critère $c_{seuil} = 0.2 - 0.5 - 0.7$ n'entrave donc pas la détection du front de flamme épaissie. L'introduction du paramètre restrictif c_{seuil} agissant sur le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} n'altère donc pas la capacité de TFM-M1 à représenter un régime de déflagration.

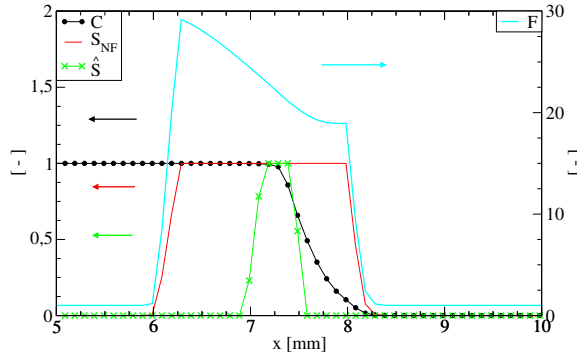


FIGURE 5.13 – Vérification du bon fonctionnement de TFM-M1 (cas B15 - $\Delta_x = 100\mu\text{m}$, branche pauvre). L'épaississement englobe l'ensemble du front, conformément aux propriétés de TFM-M0. Les variations de \mathcal{F} à travers le front de flamme sont dues à la stratification en composition ($\phi \approx 0.57$ côté GB contre $\phi \approx 0.50$ côté GF). Pour une propagation de flamme épaissie, le critère $c_{seuil} = 0.2 - 0.5 - 0.7$ n'interagit pas avec \mathcal{S}_{NF} puisque ce dernier s'active dans la zone de réaction du front de flamme située autour de $c \approx 0.8$.

Le modèle TFM-M1 est testé sur les cas A15 à B60 de façon à évaluer la capacité du critère d'avancement c_{seuil} à améliorer la description de la transition AI→déflagration en contexte LES (section 5.5.4.1). Une comparaison du bilan diffusion/réaction entre les calculs de référence et les calculs TFM-M1 permet de comprendre l'interaction entre le facteur d'épaississement et la zone d'allumage (section 5.5.4.2).

5.5.4.1 Grandeurs moyennes

En plus de sa capacité à reproduire les caractéristiques de TFM-M0 pour une propagation de flamme épaissie, TFM-M1 parvient à réduire significativement le retard à l'allumage par rapport à TFM-M0, proportionnellement à la restrictivité du critère c_{seuil} Fig.5.15. Ainsi, le critère $c_{seuil} = 0.2$, moins restrictif, induit les plus forts écarts à la référence, viennent ensuite $c_{seuil} = 0.5$, puis $c_{seuil} = 0.7$. A noter que $c_{seuil} = 0.5$ et $c_{seuil} = 0.7$ donnent des résultats proches, et qu'une valeur supérieure à $c_{seuil} = 0.5$ n'entraîne pas d'amélioration significative des résultats. Un critère unique basé sur l'avancement paraît capable d'améliorer la représentation de l'AI, bien qu'insuffisant pour reproduire le comportement de référence pour l'ensemble des cas.

En effet, pour B15 Fig.5.15b, les critères $c_{seuil} = 0.5$ et $c_{seuil} = 0.7$ permettent de reproduire l'AI du calcul de référence. Il en va de même pour B60 Fig.5.15d, malgré une légère atténuation de l'intensité du pic d'AI imputable à l'application du facteur d'épaississement. Cependant, les cas A15 Fig.5.15a et A60 Fig.5.15c affichent de forts retards à l'AI malgré l'utilisation des critères restrictifs, puisqu'ils affichent un allongement d'un facteur 1.5 à 2.0 des délais l'AI de flamme chaude pour $c_{seuil} = 0.5 - 0.7$.

En pratique, les critères restrictifs permettant aux calculs de suivre le comportement de référence aux premiers instants de l'AI, tant que $c < c_{seuil}$. Cependant lorsque $c > c_{seuil}$, une chute du dégagement de chaleur plus ou moins longue et intense selon les cas est observée. Cette chute est attribuée à l'action simultanée de deux phénomènes :

- Premièrement, les taux de réaction sont divisés par un facteur \mathcal{F}_{target} , atténuant le dégagement de chaleur par une action chimique.

- Deuxièmement, la multiplication du flux diffusif par un facteur \mathcal{F}_{target} favorise la dissipation de l'énergie libérée (pertes enthalpiques, diffusion de radicaux et chaleur vers la périphérie du noyau d'AI). Le facteur d'épaississement intensifie alors les effets de dissipation scalaire résolu, ce qui participe à retarder l'allumage. Le dégagement de chaleur est donc également atténué par une action diffusive. Cet effet est plus amplement décrit en section 5.5.4.2.

Outre le retard à l'AI (bien que limité par le critère c_{seuil}), l'application du facteur d'épaississement dans la zone d'allumage biaise le dégagement de chaleur global. Cela est particulièrement visible sur les températures moyennes des calculs TFM-M1, dépassant largement celle des calculs de référence Fig.5.16, plus particulièrement pour A15 Fig.5.16a et A60 Fig.5.16c. Cela est attribué à un effet de mélange entre les régions riche et pauvre entourant la zone d'allumage. Cet effet est généré par une intensification des effets diffusifs attribuée au facteur d'épaississement, qui tend notamment à étaler la région proche-stœchiométrie, source d'un dégagement de chaleur important (voir section 5.5.4.2). L'amplification des phénomènes de mélange est moins marqué pour B15 Fig.5.16b et B60 Fig.5.16d.

L'augmentation du critère c_{seuil} semble à première vue augmenter l'excès de dégagement de chaleur. En réalité, cet excès est, pour les valeurs de c_{seuil} faibles, atténué par un retard à l'AI plus important. L'augmentation de c_{seuil} ne favorise donc pas, en tant que telle, une surestimation du dégagement de chaleur.

Remarque : la définition de la variable d'avancement utilisée ici biaise le fonctionnement du modèle TFM-M1 dans certaines conditions. En effet, au delà de $\phi = 2.0$, les produits carbonés CO et CO_2 ne sont plus majoritaires et la définition de l'avancement utilisée ici ne peut plus être considérée valide. Or, les cas A15 à B60 impliquent deux fronts de réaction : un front propageant côté méthane (branche pauvre telle que $\phi < 2.0$), et un front propageant côté pilote (branche riche telle que $\phi > 2.0$). En pratique, l'avancement côté GB peut prendre des valeurs inférieures à $c = 0.5$ à richesse élevée Fig.5.14. Le critère c_{seuil} conditionnant le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} dans TFM-M1, empêche alors totalement l'application du facteur d'épaississement dans la branche riche. Sa propagation est donc sous-résolue et entraîne des oscillations de dégagement de chaleur Fig.5.15, similaire à celles des test no-model Fig.5.5.

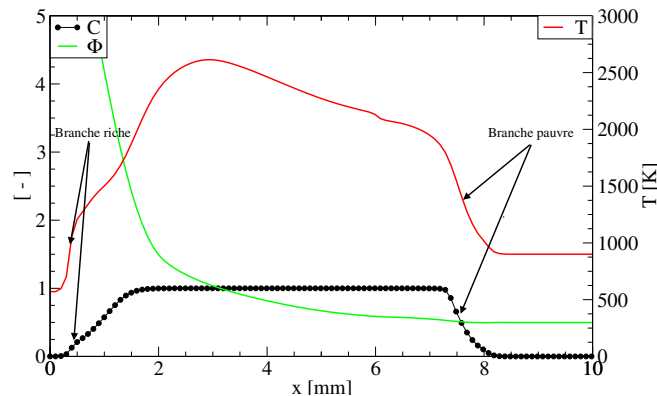


FIGURE 5.14 – Illustration du problème concernant la variable d'avancement à richesse élevée (cas B15 - $\Delta_x = 100\mu\text{m}$). La **branche riche** (à gauche du domaine) implique côté GB des avancements proches de $c \approx 0.30$. Le critère $c_{seuil} = 0.5$ empêche donc la détection du front et l'application du facteur d'épaississement. La branche riche est sous-résolue.

Toutefois, il est souligné que les conditions de richesse pour lesquelles TFM-M1 échoue à résoudre la propagation du front, correspondent typiquement aux conditions rencontrées au centre du jet pilote, dans le cadre d'un calcul moteur LES 3D.

L'importance des effets de sous-résolution remarqués pour la branche riche est alors considérée négligeable, pour deux principales raisons : (i) dans le cadre d'une application Dual-Fuel réelle, les conditions de richesses extrêmes rencontrées dans le jet pilote sont probablement hors des limites d'inflammabilité du mélange turbulent air/ CH_4 /n-dodécane, (ii) la masse de carburant pilote ne représente qu'une faible fraction de la masse globale de carburant

introduite (de l'ordre de 10 – 20%), et brûle essentiellement en AI, régime ne nécessitant par définition pas l'application du modèle TFM.

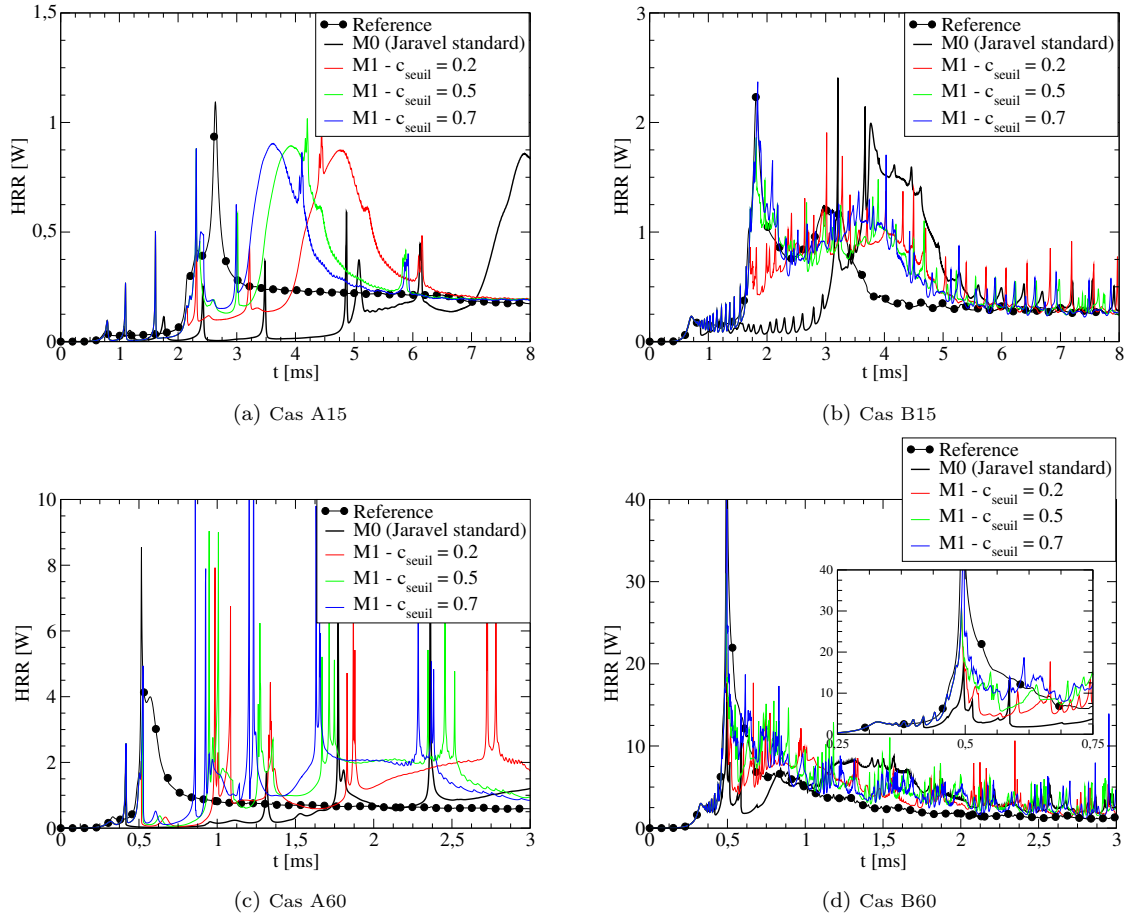


FIGURE 5.15 – Comparaison en dégagement de chaleur entre les calculs de référence et les calculs TFM-M0, TFM-M1 pour $c_{seuil} = 0.2, 0.5, \text{ et } 0.7$, sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$. Les délais d'AI sont fortement allongés par M0, et dans une moindre mesure par M1.

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target|st} = 50$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 30$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 20$.
 Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target|st} = 120$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 70$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 60$.

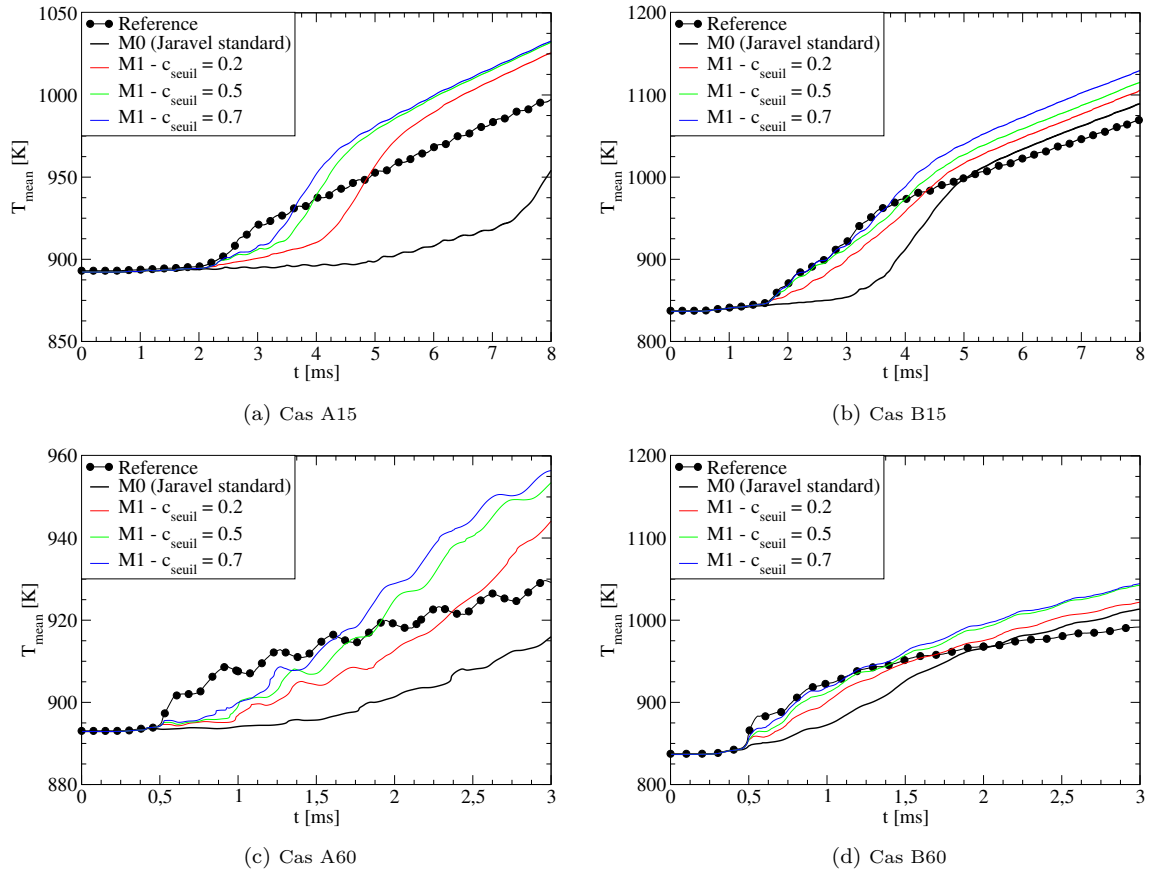


FIGURE 5.16 – Comparaison en température moyenne entre les calculs de référence et les calculs TFM-M0, TFM-M1 pour $c_{seuil} = 0.2, 0.5, \text{ et } 0.7$, sur un maillage $\Delta x = 100\mu\text{m}$. Une surestimation significative de la température moyenne accompagne M1.

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 50$, $\mathcal{F}_{target}|_{Z_{MR}} = 30$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 20$.

Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 120$, $\mathcal{F}_{target}|_{Z_{MR}} = 70$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 60$.

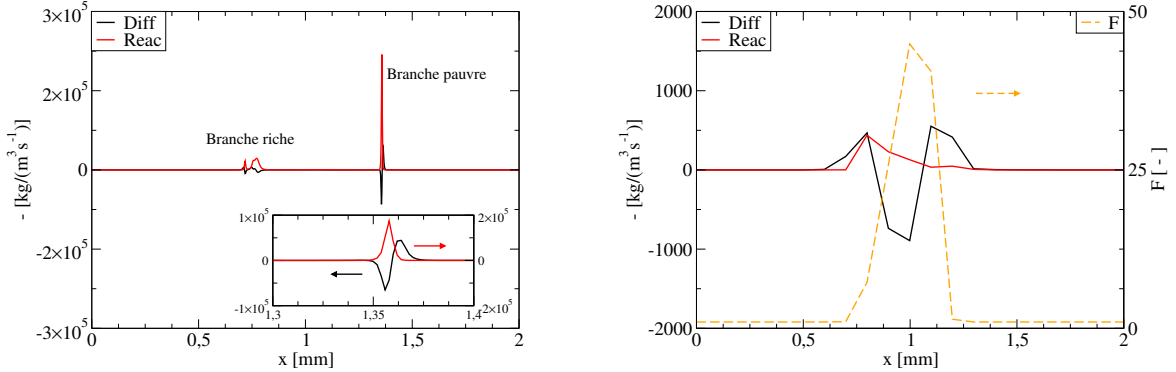
5.5.4.2 Influence du modèle sur le bilan diffusion/réaction à l'allumage

Comme discuté en section 5.5.4.1, TFM-M1 inhibe fortement l'AI du cas A60 (délais d'AI HTC allongés d'un facteur 2) Fig.5.15c, mais affecte très peu l'AI du cas B60 Fig.5.15d, bien que partageant les mêmes conditions thermodynamiques. Ainsi, une comparaison des termes diffusifs et réactifs est réalisée sur les cas A60 et B60 (TFM-M1 - $c_{seuil} = 0.5$), affichant des comportements très différents. Le bilan diffusion/réaction des calculs TFM-M1 est également comparé à celui des calculs de référence afin de comprendre l'influence du facteur d'épaisseur selon les cas. L'instant $t = 0.6\text{ms}$ sélectionné pour le bilan diffusion/réaction Fig.5.17 et 5.19 correspond à l'apparition de l'AI (HTC), et permet d'analyser le rôle du facteur d'épaisseur sur le noyau d'AI aux premiers instants de l'allumage.

Cas A60 : L'application du facteur d'épaisseur se traduit pour A60 par une forte inhibition du terme réactif entraînant une dominance très marquée du flux diffusif Fig.5.17b. Ceci est contraire à la dominance du terme réactif du calcul de référence Fig.5.17a. Le flux diffusif important entraîne alors une dissipation du dégagement de chaleur, notamment visible par une chute de la température maximale dans la zone d'allumage Fig.5.18a et 5.18b illustrant une inhibition forte de l'AI.

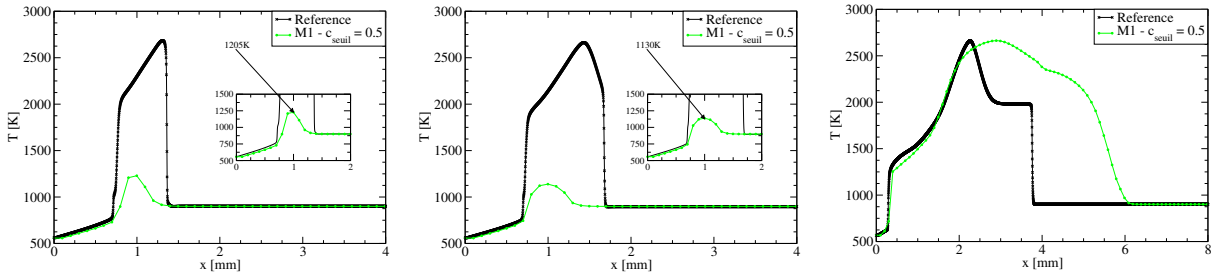
En outre, l'intensification des effets diffusifs générée par TFM-M1 entraîne une forte dissipation de la zone de mélange. L'étendue du pic de température proche-stœchiométrie est amplifiée d'un facteur 4 par rapport au calcul de référence Fig.5.18c. L'étalement spatial de la région proche-stœchiométrie induit une propagation trop rapide du front de flamme épaissi, dépassant largement le front de référence à mesure de sa propagation Fig.5.18c. L'amplification des phénomènes de mélange donne ainsi lieu à une forte surestimation du dégagement de chaleur

global Fig.5.16c. Ce phénomène est très intense pour A60 en raison des fortes valeurs de \mathcal{F}_{target} et de la faible étendue de la zone de mélange (i.e forte raideur), comparativement à l'épaisseur de flamme épaissie ($\mathcal{F}_{target}\delta_L \approx L_{spot}$).



(a) $t = 0.6ms$: Cas A60 - calcul de référence. Encadré : branche pauvre i.e. propageant côté méthane.
 (b) $t = 0.6ms$: Cas A60 - calcul M1 - $c_{seuil} = 0.5$. Activation de l'épaississement ($c > 0.5$). Les branches riche et pauvre sont confondues.

FIGURE 5.17 – Cas A60 : Comparaison spatiale des termes de réaction et de diffusion pour le calcul de référence (gauche), et TFM-M1 - $c_{seuil} = 0.5$ (droite) à l'instant $t = 0.6ms$ où survient l'AI (HTC). La branche pauvre (propageant côté méthane) constituant la zone d'intérêt de l'étude est discriminée de la branche riche pour plus de clarté. A60 est fortement impacté par le facteur d'épaississement puisque le bilan diffusion/réaction du calcul TFM-M1 est dominé par le terme diffusif, contrairement au calcul de référence.



(a) $t = 0.6ms$: AI (HTC) entraînant l'activation du facteur d'épaississement.
 (b) $t = 0.7ms$: Dissipation AI. Baisse de la température maximale pour M1.
 (c) $t = 3.0ms$: Propagation de flamme côté méthane. Étalement du pic de température proche-stœchiométrie pour M1.

FIGURE 5.18 – Cas A60 : Comparaison spatiale des profils de température pour le calcul de référence, et TFM-M1 - $c_{seuil} = 0.5$ appliqué à un maillage $\Delta_x = 100\mu m$. Le retard à l'allumage ainsi que l'élargissement du pic de température proche-stœchiométrie par intensification des effets diffusifs sont très remarquables (TFM-M1). L'activation du facteur d'épaississement engendre une dissipation de l'énergie dégagée par AI, visible par une baisse de la température maximale.

Cas B60 : Pour B60, l'application du facteur d'épaississement atténue la dominance du terme réactif Fig.5.19b, dont l'amplitude dépasse toutefois sensiblement celle du terme diffusif sur l'ensemble du front. Cette prépondérance du terme réactif est similaire à celle observée pour le calcul de référence Fig.5.19a, bien que moins marquée. Le bilan diffusion/réaction apparaît donc moins affecté pour B60 Fig.5.19b que pour A60 Fig.5.17b. L'application d'un facteur d'épaississement ne perturbe pas l'équilibre des termes diffusifs et réactifs avec la même intensité selon la typologie de la zone d'AI. Le cas B60 ($L_{spot} = 10.0mm$), dont la stratification est plus étendue que A60 ($L_{spot} = 1.0mm$) est ainsi moins sensible au facteur d'épaississement, bien qu'il partage des conditions thermodynamiques identiques.

L'évolution du profil de température montre, malgré un retard à l'AI de flamme chaude, une relative proximité entre le front de flamme épaissie (TFM-M1, $c_{seuil} = 0.5$) et le front de référence Fig.5.20a et 5.20b. L'intensification des effets diffusifs induit un impact modéré sur B60, puisque l'étendue spatiale du pic de température proche-stœchiométrie est multipliée par un facteur 1.2 environ Fig.5.20c, contre un facteur 4 pour A60 Fig.5.18c. En outre, le dégagement de chaleur global de la zone de mélange est relativement proche de celui du calcul de référence,

malgré une surestimation de la température moyenne notable, attribuée à l'amplification des phénomènes de mélange riche/pauvre Fig.5.16d (étalement de la zone proche-stoechiométrie). Cet excès est également moins intense pour B60 que pour A60, en raison d'une stratification initiale moins raide, moins sensible aux effets de sur-diffusivité induit par TFM-M1.

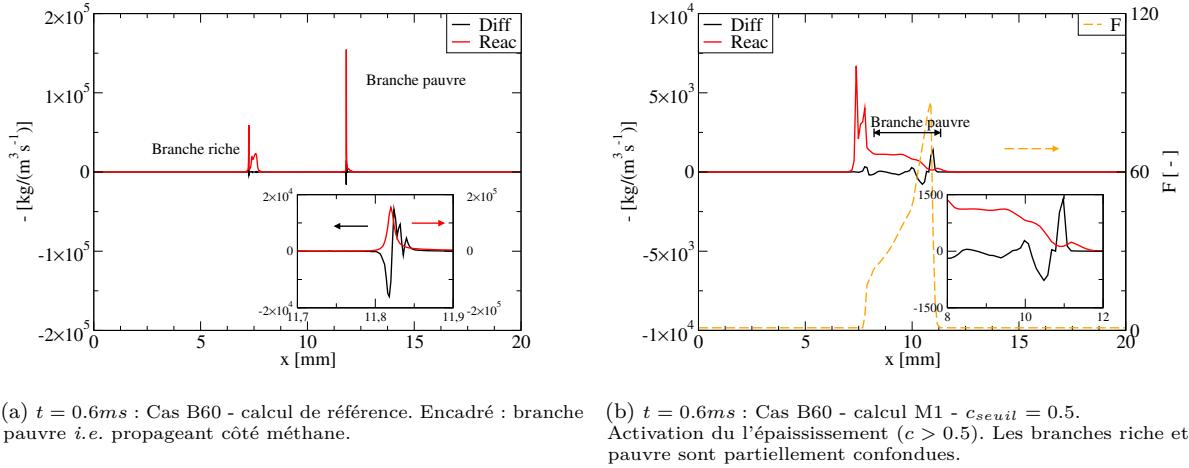


FIGURE 5.19 – Cas B60 : Comparaison spatiale des termes de réaction et de diffusion pour le calcul de référence (gauche), et TFM-M1 - $c_{seuil} = 0.5$ (droite) à l'instant $t = 0.6ms$ où survient l'AI (HTC). La branche pauvre (propageant côté méthane) constituant la zone d'intérêt de l'étude est discriminée de la branche riche pour plus de clarté. B60 est peu impacté par l'application du facteur d'épaississement puisque le bilan diffusion/réaction du calcul TFM-M1 est dominé par le terme réaction, tout comme pour le calcul de référence, bien que de façon moins marquée.

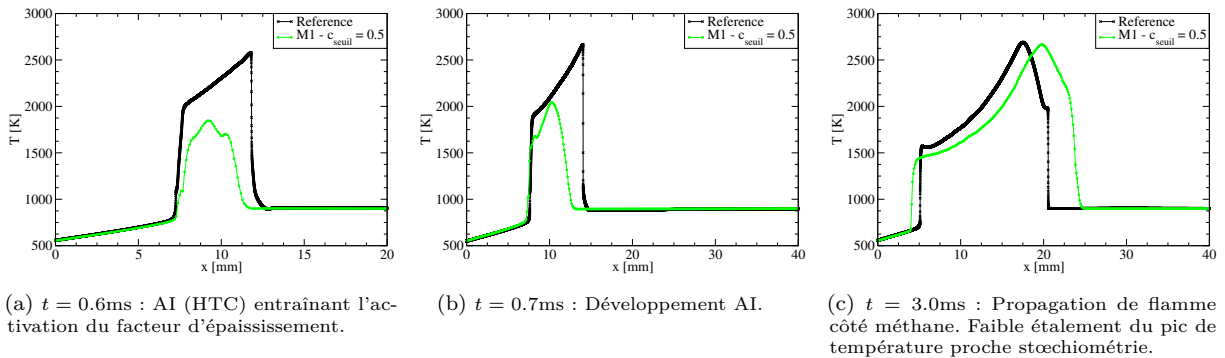


FIGURE 5.20 – Cas B60 : Comparaison spatiale des profils de température pour le calcul de référence, et TFM-M1 - $c_{seuil} = 0.5$ appliqué à un maillage $\Delta_x = 100\mu m$. Le retard à l'allumage ainsi que l'élargissement du pic de température proche-stoechiométrie par intensification des effets diffusifs (M1) sont modérés. L'activation du facteur d'épaississement engendre un retard de à l'AI modéré (TFM-M1).

Le bilan diffusion/réaction ainsi que l'analyse des effets liés à l'intensification des phénomènes diffusifs (*i.e.* mélange riche/pauvre) est réalisé ci-dessus sur A60 et B60. Toutefois, les tendances révélées sont également considérées valides pour les cas A15 et B15. De fait, le retard à l'AI plus important pour A15 que B15, est attribué à une perturbation plus forte du bilan diffusion/réaction. Aussi, la surestimation de la température moyenne est plus forte pour A15 que B15 en raison d'une stratification initiale plus raide, plus favorable aux effets de sur-diffusivité liés au modèle TFM-M1. Cela n'est pas détaillé car redondant avec les analyses conduites sur A60 et B60.

5.5.4.3 Conclusions des modèles TFM-M0 et TFM-M1

Dans cette section, le modèle original TFM-M0 développé par Jaravel [48] a été appliqué aux cas A15 à B60 sur un maillage de niveau LES, et comparé aux calculs de référence utilisant un maillage de niveau DNS. Pour l'ensemble des cas, TFM-M0 est incapable de distinguer un élément de surface de flamme d'un noyau d'AI, et entraîne l'application d'un facteur d'épaississement dans la zone d'allumage. Cela ralentit fortement la cinétique réactionnelle et allonge les délais d'AI, rendant l'utilisation de TFM-M0 non-envisageable pour traiter des phénomènes de transition AI→déflagration.

De fait, l'introduction d'un critère d'avancement c_{seuil} permet d'atténuer l'influence du facteur d'épaississement pour les faibles avancements, et ainsi reproduire le comportement des calculs de référence en AI. Ce critère d'avancement découle de l'hypothèse n°1, et s'applique au senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} : c'est le modèle TFM-M1. Les valeurs $c_{seuil} = 0.5$ et $c_{seuil} = 0.7$ montrent un fort potentiel d'amélioration puisqu'elles permettent d'éliminer l'allongement des délais d'AI pour les cas B15 et B60, tout en conservant les propriétés essentielles de TFM-M0 pour la propagation de flamme. Toutefois, cette approche est insuffisante puisque les cas A15 et A60 plus fortement stratifiés subissent une forte augmentation des délais d'AI.

Ainsi, une analyse du bilan diffusion/réaction des cas A60 et B60 (TFM-M1 - $c_{seuil} = 0.5$) révèle les tendances suivantes : (i) les effets de sur-mélange dûs au facteur d'épaississement tendent à dissiper le noyau d'AI (pertes d'enthalpie, diffusion de radicaux et de chaleur vers la périphérie du noyau), (ii) plus le gradient de mélange est raide, plus le noyau d'AI est sensible aux effets de sur-mélange et de dissipation, (iii) plus le noyau d'AI est dissipé, plus son allumage est retardé.

Ces tendances expliquent notamment pourquoi TFM-M1 génère de forts retards à l'AI sur les cas A15 et A60, et non sur B15 et B60 malgré des facteurs d'épaississement et des conditions respectivement identiques.

Par ailleurs, la proximité des résultats obtenus pour $c_{seuil} = 0.5$ et $c_{seuil} = 0.7$ semble montrer que le potentiel d'amélioration des critères portant sur \mathcal{S}_{NF} , est limité. En d'autres termes, accroître la valeur de c_{seuil} ne semble pas une solution acceptable, et pourrait même empêcher la détection du front par le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} dans le cas où c_{seuil} serait trop proche de 1.0.

Cela met en évidence une limitation sur laquelle TFM-M1 est construit :

Lorsqu'un facteur d'épaississement (représentatif moteur) de l'ordre de 50 à 100 s'applique à la zone d'allumage, la cinétique réactionnelle est fortement ralentie et l'approximation $\tau_{AI}^{c=0.2-0.5-0.7} \approx \tau_{AI}^{c=1.0}$ n'est plus valide.

Un critère d'avancement représentatif d'une AI de flamme chaude tel que $c_{seuil} > 0.5$ ne permet plus de représenter (par approximation) le début de la transition AI→déflagration, mettant en défaut l'hypothèse n°1 (section 5.2).

Ces constats rendent alors l'utilisation de TFM-M1 en conditions moteur LES 3D inadaptée. Cela encourage donc le développement d'une modélisation différente de la transition AI→déflagration en contexte TFM.

5.5.5 Formulation de modèles portant sur l'indicateur de flamme ψ : TFM-M2 et TFM-M2_{destr}

L'approche TFM-M0 génère un allongement significatif des délais d'AI. Cet allongement parvient à être atténué par TFM-M1 via l'introduction d'un "simple" critère d'avancement c_{seuil} portant sur le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} . Toutefois, TFM-M1 ne permet pas de reproduire le comportement de l'ensemble des calculs de référence, et son utilisation en conditions LES moteur 3D paraît inadaptée (section 5.5.3). En réponse à cela, les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} présentés ci-après ont été développés afin de représenter une propagation de flamme épaissie, tout en éliminant l'allongement des délais d'AI imputable au facteur d'épaississement.

5.5.5.1 TFM-M2

Afin d'améliorer la description de la transition AI→déflagration, le modèle TFM-M2 adopte un fonctionnement bimodal comprenant un mode AI, et un mode déflagration. Ce choix est motivé par le souhait de préserver le fonctionnement du modèle TFM-M0 (éprouvé et générique) lorsque le régime de déflagration est atteint, tout en monitorant l'épaississement d'une façon particulière durant l'AI. De fait, les développements de TFM-M2 concernent essentiellement le mode AI, le mode déflagration étant en pratique identique à TFM-M0.

Le fonctionnement bimodal de TFM-M2 implique principalement :

- Une ré-écriture du senseur final $\hat{\mathcal{S}}$.
- Une modification du paramètre de sensibilité β .
- Une modification des termes de création/destruction de ψ .
- L'introduction d'une variable transportée supplémentaire $\psi_{burntgas}$.

Des champs illustrent le fonctionnement de TFM-M2 appliqué au cas B15 Fig.5.26, et une description algorithmique des modes AI et déflagration est respectivement présentée dans les algorithmes 4 et 6.

Mode AI :

Objectif général : Le mode AI vise à introduire un temps de réponse à l'épaississement permettant une relaxation progressive de $\mathcal{F} = 1$ vers $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{target}$, sur une durée théoriquement suffisante au développement de l'AI ainsi qu'à la transition AI→déflagration.

Le critère d'avancement c_{seuil} utilisé dans le modèle TFM-M1 est repris ici, et sert à "marquer" le début de la transition AI→déflagration (hypothèse n°1). La relaxation vers \mathcal{F}_{target} débute donc lorsque des valeurs supérieures à c_{seuil} sont rencontrées dans le noyau d'AI. Contrairement à TFM-M1, c_{seuil} ne conditionne pas \mathcal{S}_{NF} mais le terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^+$. Toutefois la conséquence est la même pour des avancements inférieurs à c_{seuil} : le facteur d'épaississement vaut 1.0 (i.e. le modèle TFM est inopérant).

L'introduction d'un temps de relaxation vise à limiter l'influence du facteur d'épaississement sur le noyau d'AI, et l'augmentation des délais d'allumage qui en découle (TFM-M0 et TFM-M1, sections 5.5.2 et 5.5.4). En effet, d'après les constats de l'étude 1D (chapitre 4), la transition AI→déflagration s'effectue sur des durées de l'ordre de 1.0ms (section 4.2.6.5) assimilées au temps d'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée piloté par un relatif équilibre diffusion/réaction (section 4.2.6.2). Or, le modèle TFM conserve les propriétés principales d'une flamme pré-mélangée (vitesse, zones de pré-chauffage/réaction, et profil d'espèces, au facteur d'épaississement près). Une flamme pré-mélangée épaissie obéit donc également à un équilibre diffusion/réaction, et possède un temps caractéristique assimilable à un temps de flamme épaissie \mathcal{T}_{flamme} , ce qui permet une hypothèse simplificatrice.

Hypothèse n°2 : Le temps d'établissement d'un profil de flamme épaissie à partir d'un front de réaction quelconque (en l'occurrence un front d'AI) est proportionnel à un temps de flamme épaissie $\mathcal{T}_{flamme} = \mathcal{F}_{target}(\delta_L/S_L)$.

Il est souligné qu'en conditions typiques-moteur : (i) le temps de flamme épaissie \mathcal{T}_{flamme} est de l'ordre de 1.0ms (ii) le pic de dégagement de chaleur par AI (HTC) s'étend sur des durées de l'ordre de 0.1ms (section 5.2) (iii) la transition AI→déflagration s'étend sur des durées τ_{trans} de l'ordre de 1.0ms (section 4.2.6.5).

De fait, un temps de relaxation vers \mathcal{F}_{target} similaire à un temps de flamme épaissie \mathcal{T}_{flamme} de l'ordre de 1.0ms est donc a priori :

- Long devant un pic de dégagement de chaleur par AI (HTC) de l'ordre de 0.1ms. Cela implique que l'AI a le temps de se développer avant que le facteur d'épaississement n'ait atteint sa valeur nominale \mathcal{F}_{target} , et donc que l'AI subit peu l'influence du modèle TFM (i.e. pas/peu d'augmentation des délais).
- Similaire au temps d'établissement \mathcal{T}_{flamme} d'un profil de flamme épaissie, et donc suffisant pour établir un front de flamme épaissie sans perturber significativement le bilan diffusion/réaction.
- Similaire aux durées τ_{trans} observées sur les calculs de référence, et donc cohérent avec la physique "réelle" de la transition AI→déflagration.

La mise en place de ce temps de relaxation passe par un traitement particulier de l'indicateur de flamme ψ et du senseur de réaction $\hat{\mathcal{S}}$, décrits ci-après.

Indicateur de flamme ψ et senseur de flamme $\hat{\mathcal{S}}$: Pour rappel, TFM-M0 et TFM-M1 impliquent deux couplages (sections 3.3.3.4 et 5.5.3) :

- L'épaississement est relié au senseur final $\hat{\mathcal{S}}$ par la relation suivante : $\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{target} - 1)\hat{\mathcal{S}}$.
- Le senseur final $\hat{\mathcal{S}}$ est lié au senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} par la relation suivante : $\hat{\mathcal{S}} = \max(\min(\psi, 1), \mathcal{S}_{NF})$.

L'AI (HTC) s'accompagne d'un dégagement de chaleur bref, et de forte intensité. En pratique, les couplages susmentionnés entraînent l'application instantanée du facteur d'épaississement \mathcal{F}_{target} lorsque l'AI (HTC) survient (bien que cela soit retardable via c_{seuil} pour TFM-M1, section 5.5.3).

L'écriture standard de $\hat{\mathcal{S}}$ a donc un caractère instantané, incompatible avec une relaxation progressive vers \mathcal{F}_{target} sur des durées de l'ordre de \mathcal{T}_{flamme} , comme recherché. Le senseur final $\hat{\mathcal{S}}$ est alors découplé du senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} , et uniquement conditionné par l'indicateur ψ .

Une ré-écriture de $\hat{\mathcal{S}}$ est alors proposée Eq(5.3) :

$$\underbrace{\hat{\mathcal{S}} = \max(\min(\psi, 1), \mathcal{S}_{NF})}_{\text{standard : TFM-M0/M1}} \implies \underbrace{\hat{\mathcal{S}} = \min(\psi, 1)}_{\text{TFM-M2/M2}_{destr}} \quad (5.3)$$

Or, pour rappel (section 5.5.3), le terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^{+}$ s'écrit pour TFM-M0 et TFM-M1 : $\dot{\omega}_{\psi}^{+} = (\psi_0 - \psi)/5\Delta t$. Cela entraîne alors une relaxation vers ψ_0 en un temps infinitésimal $\tau_{num} = 5\Delta t$, et revient à une application quasi-instantanée du facteur d'épaississement nominal \mathcal{F}_{target} . La ré-écriture de $\hat{\mathcal{S}}$ Eq.(5.3) est, à elle seule, insuffisante pour induire la relaxation progressive vers \mathcal{F}_{target} recherchée. Un traitement particulier du terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^{+}$ est donc nécessaire.

Ainsi, TFM-M2 comprend une double écriture du terme de création : $\dot{\omega}_{\psi}^{+}|_{AI}$ en mode AI, et $\dot{\omega}_{\psi}^{+}|_{deflag}$ en mode déflagration. Le terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^{+}|_{AI}$ est construit de façon à relaxer de $\psi = 0$ à $\psi = 1.0$ sur une durée comparable à \mathcal{T}_{flamme} . Un paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ est ajouté de façon à allonger ou écourter le temps de relaxation. L'indicateur ψ relaxe alors vers 1.0 sur une durée comparable à \mathcal{T}_{flamme} , et \mathcal{F} vers sa valeur nominale \mathcal{F}_{target} . À noter que les termes de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GF}$ et $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$ s'appliquant lorsque $\mathcal{S}_{NF} < 0.05$ demeurent inchangés par rapport à TFM-M0 (section 3.3.3.4). Le terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^{+}$ s'exprime en mode AI comme Eq.(5.4) :

$$\dot{\omega}_{\psi}^{+} = \dot{\omega}_{\psi}^{+}|_{AI} = \frac{\psi_0 - \psi}{\psi_0(\mathcal{R}_{flametime} \times \mathcal{T}_{flamme})} \quad (5.4)$$

D'après l'hypothèse n°2, une durée comparable à \mathcal{T}_{flamme} est supposée suffisante pour établir un front de flamme épaissie à partir d'un front d'AI, tout en appliquant un facteur d'épaississement proche de 1.0 pendant

l'AI.

Le terme source $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{AI}$ s'applique lorsque deux conditions sont satisfaites :

- L'activation du senseur de réaction commandée par $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ (idem TFM-0 et TFM-M1).
- L'arrivée d'avancements supérieurs à $c_{seuil} = 0.5$ représentatifs du début de la transition AI→déflagration (idem TFM-M1).

Une illustration de l'accroissement de $\hat{\mathcal{S}}$ et de \mathcal{F} durant la transition AI→déflagration est proposée en Fig.5.26a à 5.26c (gauche).

Paramètre de sensibilité β : Le paramètre β pilote la sensibilité du senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} , et adopte deux valeurs $\beta = \beta_{AI}$ et $\beta = \beta_{deflag}$, en fonction du mode de fonctionnement. En mode déflagration, la valeur $\beta_{deflag} = 4.0$ est imposée, tout comme dans TFM-M0. En mode AI, une sensibilité supérieure $\beta = \beta_{AI}$ est imposée. La raison de ce changement est d'ordre purement pratique :

L'accroissement progressif du facteur d'épaississement aux premiers instants de la transitions AI→déflagration implique $\mathcal{F} \ll \mathcal{F}_{target}$. Les faibles facteurs d'épaississement appliqués en début de transition entraînent alors une propagation du front sous-résolue. Or, comme illustré par les calculs no-model (section 5.4), une propagation sous-résolue est instable, et s'apparente à une inflammation "cellule par cellule", accompagnée de fortes oscillations de dégagement d'énergie. Ces oscillations induisent une activation intermittente du senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} , qui entraîne à son tour une création de ψ (pour rappel lorsque $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ et $c > 0.5$) évoluant au gré des fluctuations du dégagement d'énergie.

En pratique, lorsque β est trop faible (comme $\beta_{deflag} = 4.0$), la création de ψ est fortement discontinue (effets "on-off"), ce qui empêche l'accroissement du facteur d'épaississement (via ψ). De fait, la transition vers le mode déflagration, commandée par la condition $\psi > 1.0$, n'est jamais satisfaite.

Pour contrecarrer cet effet d'intermittence, une stratégie consistant à augmenter la sensibilité du senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} est adoptée. En mode AI, une valeur élevée de $\beta_{deflag} = 100$ est appliquée. Cette stratégie permet la détection du front de façon continue, même lorsque la propagation est sous-résolue. Ainsi, le senseur de réaction satisfaisant la condition $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ de façon continue entraîne une création de ψ également continue. Cela permet alors la relaxation vers \mathcal{F}_{target} visée, et dans les délais de l'ordre de \mathcal{T}_{flamme} escomptés.

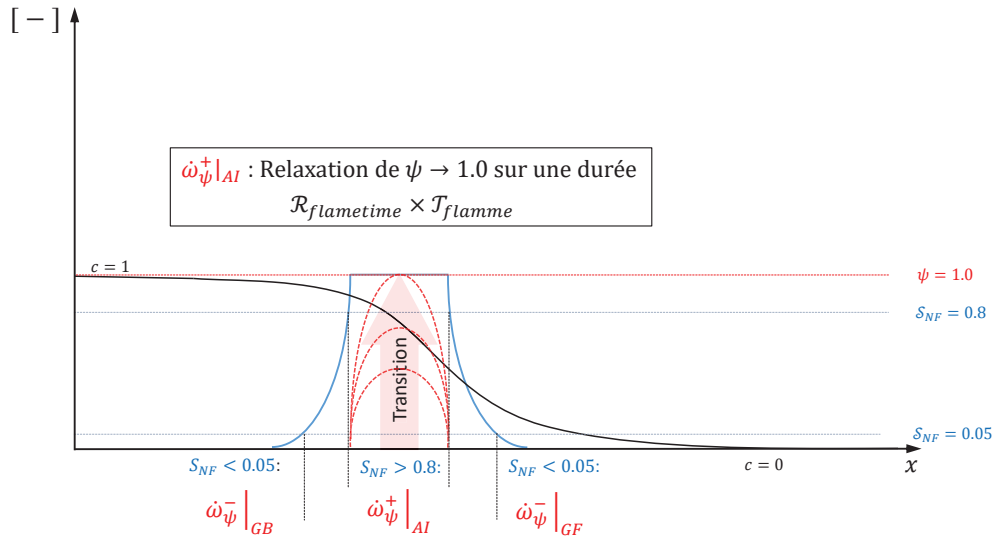


FIGURE 5.21 – Illustration des différents paramètres de TFM-M2 et TFM-M2_{destr} en mode AI. L'indicateur de flamme transporté ψ croit vers 1.0 sur une durée de l'ordre d'un temps de flamme épaissie \mathcal{T}_{flamme} , moyennant une modification du terme $\dot{\omega}_{\psi}^+$. Dans TFM-M2, les termes de destruction côté GF et GB sont identiques à ceux du modèle standard [48], contrairement à TFM-M2_{destr} impliquant une modification de $\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB}$.

Mode déflagration :

Objectif général : Le mode AI opère durant la transition AI→déflagration et permet la relaxation de $\psi = 0$ vers $\psi = 1.0$ sur des durées de l'ordre de \mathcal{T}_{flamme} . Le mode déflagration entre en action lorsque la condition $\psi > 1.0$ est satisfaite. Il vise à épaissir le front de flamme de façon à résoudre suffisamment sa propagation, et reprendre les propriétés du modèle initial TFM-M0.

Indicateur de flamme ψ : La transition vers le mode déflagration s'accompagne d'une modification du terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{deflag}$. Ce dernier s'exprime alors comme Eq.(5.5) :

$$\dot{\omega}_{\psi}^+ = \dot{\omega}_{\psi}^+|_{deflag} = \underbrace{\frac{\psi_0 - \psi}{5\Delta_t}}_{\text{idem TFM-M0/M1}} \quad (5.5)$$

Le terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^+$ reprend ainsi la valeur standard $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{deflag}$ prise dans TFM-M0 et TFM-M1 Eq.(5.5). Cela permet notamment une diffusion de ψ en amont/aval de la zone de réaction et donc l'épaississement de l'ensemble du front (i.e. zone de réaction + pré-chauffage).

Paramètre de sensibilité β : La transition vers le mode déflagration implique également un retour du paramètre de sensibilité β à sa valeur β_{deflag} usuellement fixée à 4.0 dans TFM-M0. Le maintien de $\beta = \beta_{AI}$ au sein du front de flamme épaissi (en mode déflagration) favoriserait une sur-sensibilité de \mathcal{S}_{NF} qui entraînerait un dépôt de ψ (et donc un épaississement) dans des régions éloignées du front notamment côté GB, mais aussi côté GF. L'application d'un facteur d'épaississement "loin en amont/aval" du front favoriserait alors la dissipation de la turbulence par sur-diffusivité et pourrait modifier la nature de l'interaction flamme-turbulence et le dégagement d'énergie qui en découle. Un retour à β_{deflag} en mode déflagration est donc effectué, de façon à appliquer le facteur d'épaississement à la proche périphérie du front seulement, et limiter d'éventuels effets de dissipation de la turbulence par sur-diffusivité.

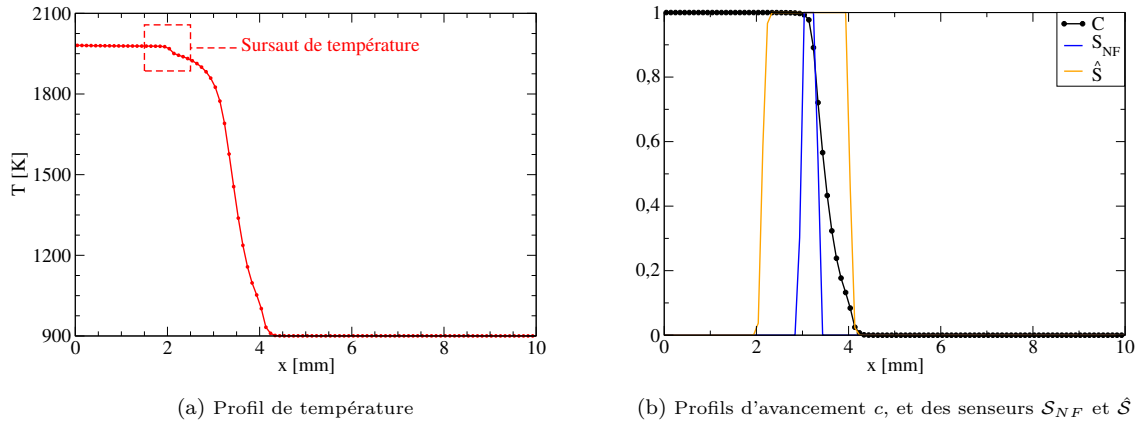


FIGURE 5.22 – Illustration du sursaut de température accompagnant la relaxation vers $\mathcal{F} = 1$ côté GB. Ce sursaut de température peut, si le paramètre β est trop élevé côté GB, entraîner l'activation du senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} , et générer un épaississement indésirable dans les gaz brûlés.

Le changement de paramètre de sensibilité β est piloté par la valeur de l'indicateur de flamme ψ : lorsque $\psi < 1.0$, alors $\beta = \beta_{AI}$ et lorsque $\psi > 1.0$, alors $\beta = \beta_{deflag}$.

En mode déflagration, la condition $\psi > 1.0$ est en pratique respectée sur l'ensemble du front de flamme épaissi Fig.5.22b, ce qui permet d'appliquer le paramètre $\beta = \beta_{deflag}$ sur l'ensemble du front, tout comme dans TFM-M0. Toutefois, la destruction de ψ côté GB (via $\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB}$) induit un retour à β_{AI} (car $\psi < 1.0$) dans une zone mettant en jeu des réactions de post-oxydation. Ces réactions faiblement exothermiques notamment visibles par un sursaut de température Fig.5.22a peuvent néanmoins satisfaire les conditions $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ et $c > 0.5$. Le sillage du front de

flamme est perçu à tort comme un élément de surface de flamme, ce qui entraîne l'activation du terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^{+}|_{deflag}$ dans la région post-flamme et l'application d'un facteur d'épaississement indésirable dans les gaz brûlés. Afin de contrecarrer cet effet, la région post-flamme convient d'être "marquée" afin de maintenir $\beta = \beta_{deflag}$ côté GB, y compris lorsque ψ relaxe vers 0.

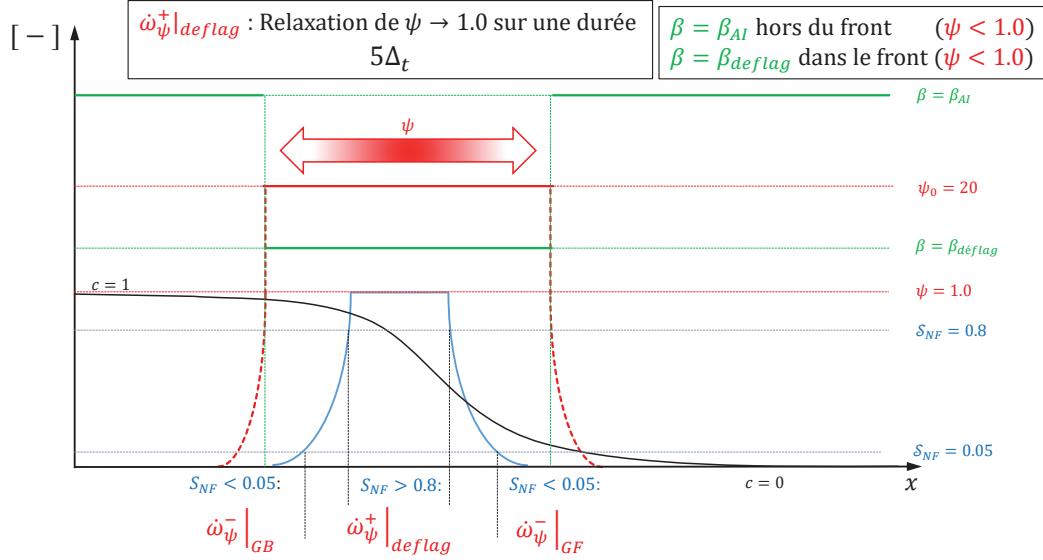


FIGURE 5.23 – Illustration des différents paramètres de TFM-M2 et TFM-M2_{destr} en mode déflagration. Les termes de création et de destruction côté GF et GB sont identiques à ceux rencontrés dans le modèle standard [48]. Toutefois, TFM-M2_{destr} implique une condition supplémentaire concernant l'activation du terme $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$.

Afin de marquer le sillage du front de flamme et empêcher l'application d'un facteur d'épaississement dans les gaz brûlés via $\dot{\omega}_{\psi}^{+}$, trois éléments sont introduits :

- Une variable transportée supplémentaire $\psi_{burntgas}$.
- Un paramètre de seuil $\psi_{burntgas}^{seuil}$.
- Un paramètre de plafond $\psi_{burntgas,0}$.

L'indicateur de gaz brûlés $\psi_{burntgas}$ répond à l'équation de transport Eq.(5.6) et est sur le principe analogue à l'indicateur de flamme ψ . Néanmoins, il possède un conditionnement lui permettant d'indiquer non-pas le front de flamme comme ψ , mais les gaz brûlés.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\psi_{burntgas}) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u\psi_{burntgas}) = \nabla \cdot (\rho\mathcal{F}\Xi_{\Delta}\mathcal{D}\psi_{burntgas}\nabla\psi) + \frac{\Xi_{\Delta}}{\mathcal{F}}\rho\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} \quad (5.6)$$

Ainsi, $\psi_{burntgas}$ possède un terme de création $\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{+}$ dont l'activation est triplement conditionnée par : (i) l'activation du mode déflagration $\psi > 1.0$, (ii) l'activation du seuil de réaction $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$, (iii) des valeurs d'avancement $c > 0.5$.

Le terme $\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{+}$ permet une relaxation de $\psi_{burntgas}$ vers sa valeur plafond $\psi_{burntgas,0}$ sur un temps numérique de $5\Delta_t$. Ce dernier s'exprime alors comme Eq.(5.7) :

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{+} = \frac{\psi_{burntgas,0} - \psi_{burntgas}}{5\Delta_t} \quad (5.7)$$

Le paramètre de seuil $\psi_{burntgas}^{seuil}$ impose l'application de $\beta = \beta_{deflag}$ lorsque la condition de seuil $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ est satisfaite. Contrairement à l'indicateur de flamme ψ possédant deux termes de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GF}$ et $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$, l'indicateur de gaz brûlés $\psi_{burntgas}$ possède un unique terme de destruction côté GF $\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{-}$ activé par l'unique condition $c < 0.5$. Le terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{-}$ empêche ainsi la diffusion/convection de $\psi_{burntgas}$ dans des régions GF par un éventuel mélange entre des gaz frais et des gaz brûlés, et s'exprime comme Eq.(5.8) :

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{-} = \frac{0 - \psi_{burntgas}}{5\Delta_t} \quad (5.8)$$

L'absence de terme de destruction côté GB permet à $\psi_{burntgas}$ de diffuser "librement" dans le sillage du front de flamme et d'étendre la condition de seuil $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ à l'ensemble des gaz brûlés. En pratique, $\psi_{burntgas}$ est créé au sein du front de flamme épaissie, et diffuse "librement" au sein des gaz brûlés permettant d'appliquer $\beta = \beta_{deflag}$ dans le sillage du front.

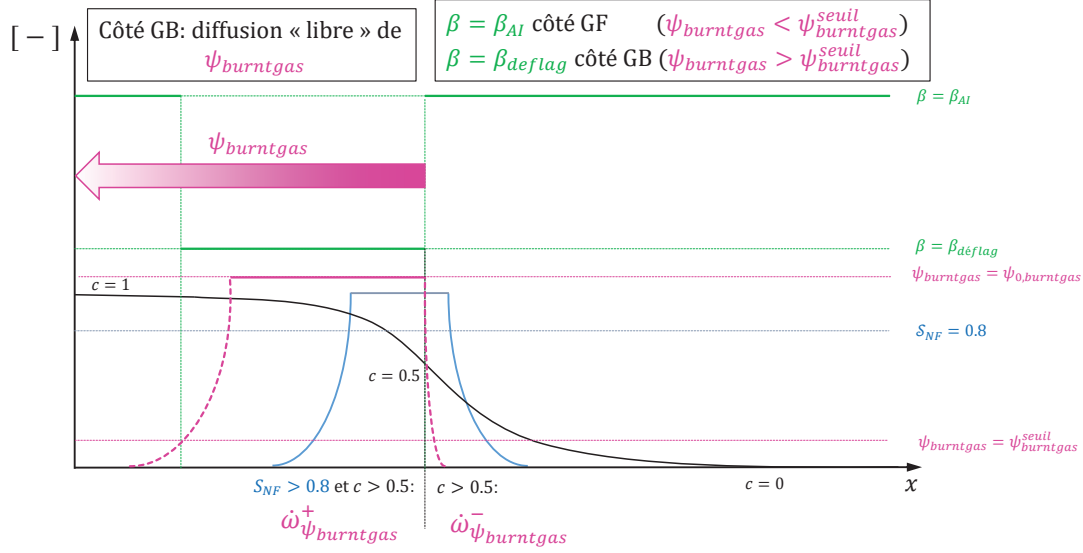


FIGURE 5.24 – Illustration des paramètres de TFM-M2 et TFM-M2_{destr} pilotant $\psi_{burntgas}$ et le paramètre β . $\psi_{burntgas}$ diffuse dans le sillage du front de flamme, et relaxe vers 0 côté GF. Les régions satisfaisant la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ sont marquées comme étant des GB et se voient appliquer $\beta = \beta_{deflag}$.

Dans ce travail, $\psi_{burntgas,0}$ et $\psi_{burntgas}^{seuil}$ sont respectivement imposés à 2.0 et 0.05. Ces valeurs ont été choisies de façon arbitraire, mais en gardant à l'esprit $\psi_{burntgas,0} \gg \psi_{burntgas}^{seuil}$ de façon à satisfaire la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ permettant d'appliquer $\beta = \beta_{deflag}$ dans le sillage du front. Bien que n'ayant été l'objet d'aucune étude de sensibilité, la valeur de ces deux paramètres n'est pas supposée influencer notablement sur le fonctionnement du modèle, dès lors que $\psi_{burntgas,0} \gg \psi_{burntgas}^{seuil}$.

Résumé du modèle TFM-M2 : Le modèle TFM-M2 présente des caractéristiques permettant une relaxation de l'épaississement vers \mathcal{F}_{target} sur des durées proportionnelles à \mathcal{T}_{flamme} . Ce temps de flamme épaissie \mathcal{T}_{flamme} est comparable à la durée de la transition AI→déflagration τ_{trans} observée dans l'analyse fondamentale du chapitre 4 (section 4.3). De plus, le temps \mathcal{T}_{flamme} est supposé permettre le développement de l'AI sans interaction avec le facteur d'épaississement (hypothèse n°1) et permettre l'établissement d'un front de flamme épaissie tout en respectant a priori le relatif équilibre diffusion/réaction s'exerçant sur le front de réaction (hypothèse n°2). Toutefois, la coexistence de termes antagonistes de création ($\dot{\omega}_{\psi}^+|_{deflag}$) et de destruction ($\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GF}$ et $\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB}$) d'amplitude potentiellement comparables, s'appliquant au front de réaction en mode AI se traduisent dans certains cas par une compétition entre ceux-ci. Cela peut entraîner une transition vers le mode déflagration très tardive, voire des problèmes de non-transition (lorsque le terme de destruction l'emporte) rendant in fine le modèle TFM inopérant. Ce problème est discuté en section 5.5.6.

Une réponse à cette problématique impliquant un reconditionnement du terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB}$ est proposée dans le modèle TFM-M2_{destr}.

5.5.5.2 TFM-M2_{destr}

Pour le modèle TFM-M2, la transition vers le mode déflagration peut dans certains cas échouer. Le modèle TFM-M2_{destr} a été développé afin de préserver les propriétés de TFM-M2, tout en garantissant une meilleure robustesse du changement vers le mode déflagration, essentiel à la propagation d'une flamme épaissie. Pour ce faire, le rôle de la variable transportée $\psi_{burntgas}$ est modifié :

Dans TFM-M2, $\psi_{burntgas}$ conditionne uniquement β selon le mode de combustion (AI/déflagration). Dans TFM-M2_{destr}, $\psi_{burntgas}$ conditionne β mais aussi le terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$. Ainsi, l'unique différence entre TFM-M2 et TFM-M2_{destr} concerne le terme $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$.

Des champs illustrant le fonctionnement de TFM-M2_{destr} appliqué au cas B15 sont présentés en Fig.5.27 et une description algorithmique des modes AI et déflagration est respectivement présentée dans les algorithmes 5 et 7.

Mode AI :

Le terme de création $\dot{\omega}_{\psi}$ s'active dans la zone de réaction rencontrée autour d'avancements élevés ($c \approx 0.8$), or, cette zone est située en aval du front et donc proche des gaz brûlés (côté GB). De fait, le terme de création $\dot{\omega}_{\psi}$ entre essentiellement en compétition avec le terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$ côté GB, par proximité spatiale, et relativement peu avec le terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GF}$ côté GF. Afin de limiter les problèmes de non-transition vers le mode déflagration observés pour TFM-M2, le terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$ est donc désactivé en mode AI dans TFM-M2_{destr}. Le fonctionnement du terme $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GF}$ est quant à lui identique par rapport à TFM-M0, TFM-M1, et TFM-M2.

$$\underbrace{\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}}_{\text{Valeur nominale}} \xrightarrow{\psi > 0} 0 \implies \dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB} = 0 \quad (5.9)$$

Ainsi, la désactivation du terme $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$ en mode AI Eq.(5.9), favorise en pratique la transition vers le mode déflagration ($\psi > 1.0$) : la relaxation vers \mathcal{F}_{target} dans des temps proches de \mathcal{T}_{flamme} , et ce pour une plage de valeurs $\mathcal{R}_{flametime}$ élargie (voir section 5.5.6).

Le terme $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$ étant désactivé en mode AI, la quantité de ψ déposée au passage du front de réaction en mode AI subsiste dans les gaz brûlés et entraîne l'application d'un facteur d'épaississement "résiduel" dans la région post-flamme. Un traitement particulier visant à éliminer cet épaississement indésirable dans les gaz brûlés est discuté ci-dessous.

Mode déflagration :

Afin d'éliminer l'épaississement "résiduel" côté GB, le terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$ retrouve sa valeur nominale en mode déflagration. Par conséquent, en mode déflagration, ψ relaxe vers 0 côté GF mais aussi côté GB. L'activation du terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$ est pilotée par la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$. Ainsi, lors du passage du mode AI au mode déflagration, $\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB}$ retrouve sa valeur nominale Eq.(5.10) :

$$\dot{\omega}_{\psi}^{-}|_{GB} \xrightarrow{\psi < \psi_{seuil}} 0 \implies \underbrace{\frac{0 - \psi}{\mathcal{T}_{hot}}}_{\text{Valeur nominale}} \quad (5.10)$$

De plus, la diffusion "libre" de $\psi_{burntgas}$ dans les régions GB (y compris éloignées du front) permet d'éliminer la quantité "résiduelle" de ψ n'ayant pas été détruite en mode AI, et le facteur d'épaississement relaxe vers $\mathcal{F} = 1.0$ dans le sillage du front de flamme épaissie.

Cette stratégie permet alors de n'appliquer le facteur d'épaississement qu'au proche voisinage du front de flamme (zone de réaction+pré-chauffage), et donc de reproduire le comportement de TFM-M0.

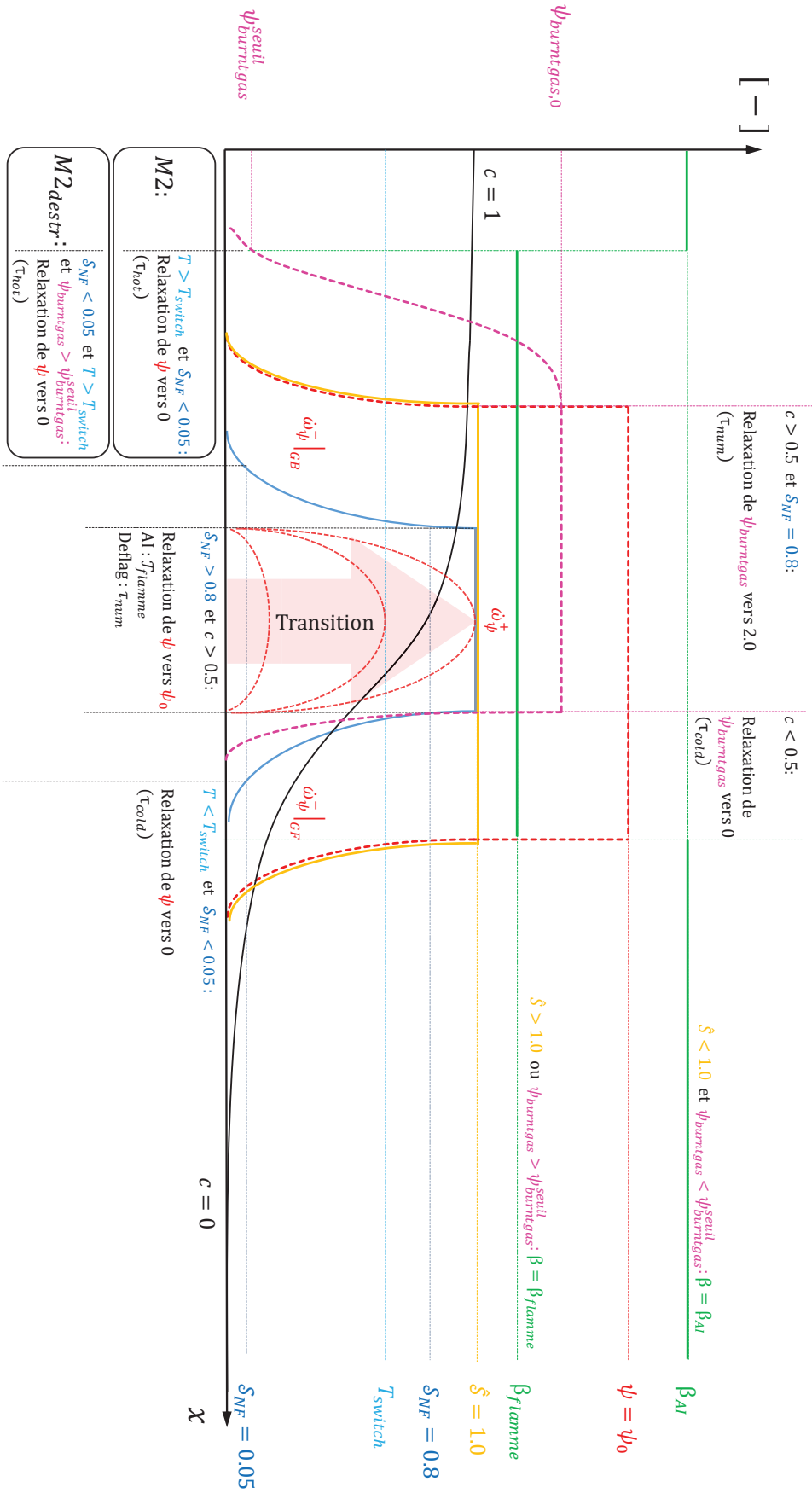


FIGURE 5.25 – Illustration des différents paramètres de TFM-M2 et TFM-M2_destr en mode AI et déflagration. Le paramètre T_{switch} est identique à celui du modèle standard [48].

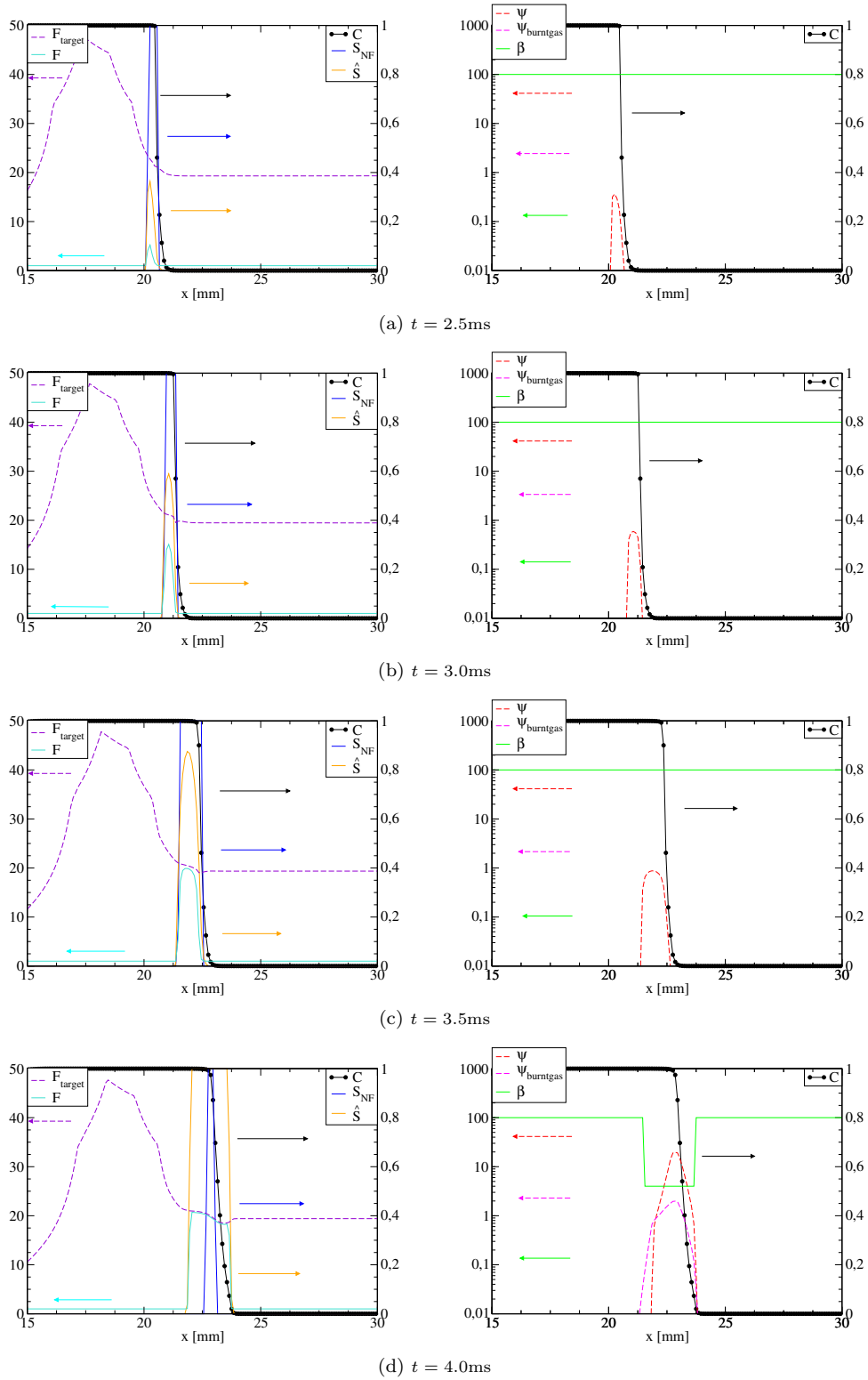


FIGURE 5.26 – B15 TFM-M2 $\Delta_x = 100\mu\text{m}$: Représentation des différents paramètres du modèle TFM-M2_{destr}, pour des instants voisins de la transition du mode AI vers le mode déflagration. Le mode AI Fig.5.26a à 5.26c montre une croissance de \hat{S} permettant une relaxation vers \mathcal{F}_{target} sur une durée de l'ordre de \mathcal{T}_{flamme} . Le mode déflagration Fig.5.26d englobe le front de flamme (*i.e.* $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{target}$ entre $c \approx 0$ et $c \approx 1.0$) montrant la capacité du modèle TFM-M2 à reproduire les caractéristiques du modèle initial TFM-M0 [48]. L'indicateur $\psi_{burntgas}$ diffuse "librement" côté GB. Le paramètre prend une valeur $\beta_{deflag} = 4.0$ dans le front de flamme et β_{AI} en amont/aval.

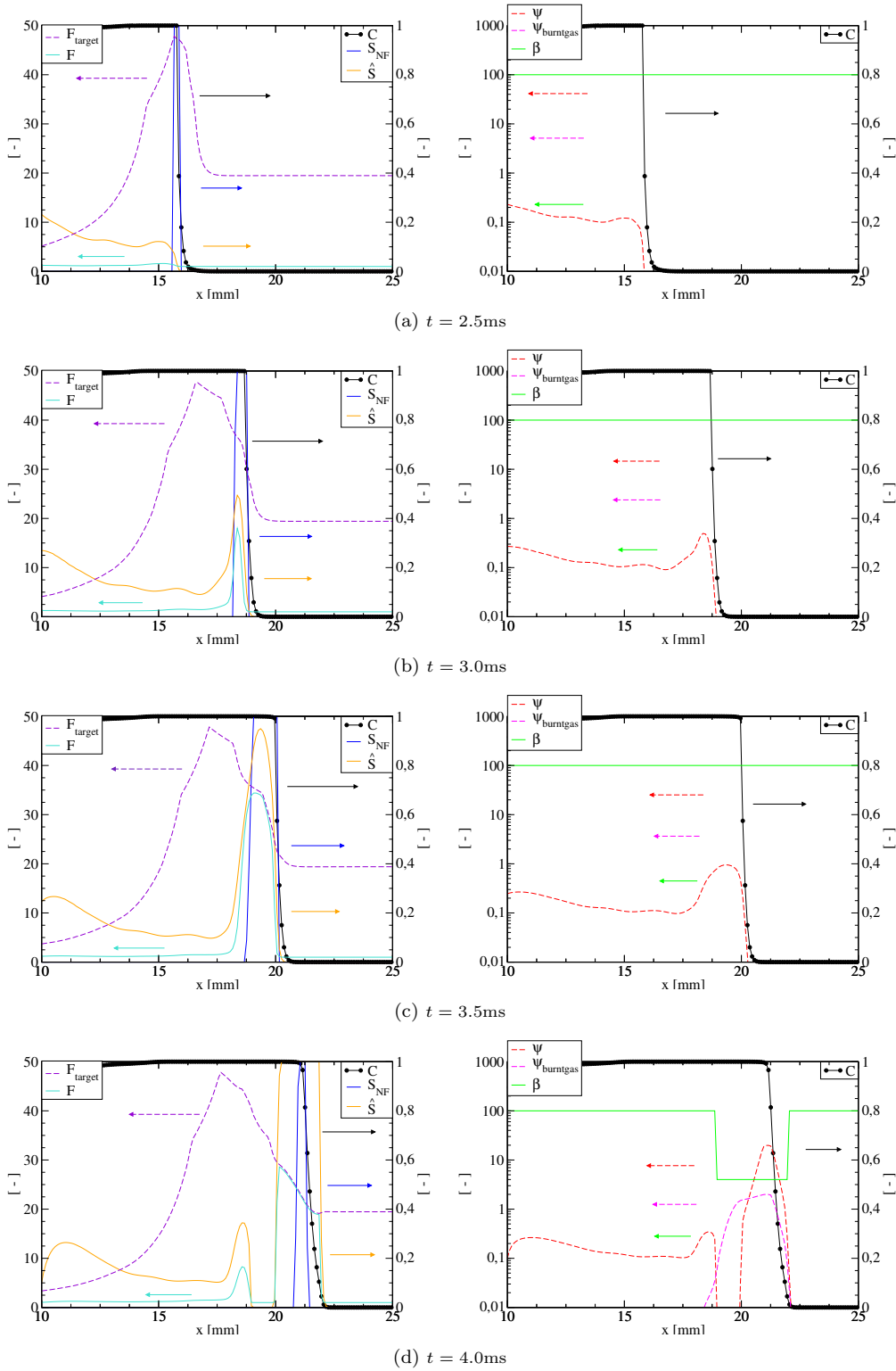


FIGURE 5.27 – B15 TFM-M2_{destr} $\Delta_x = 100\mu\text{m}$: Représentation des différents paramètres du modèle TFM-M2_{destr}, pour des instants voisins de la transition du mode AI vers le mode déflagration. Une quantité "résiduelle" de ψ subsistant dans le sillage du front est remarquée. Le mode déflagration Fig.5.27d s'accompagne d'un dépôt de $\psi_{burntgas}$ entraînant la destruction de ψ dans la région post-flamme ($\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB}$ prend sa valeur nominale Eq.(5.9) lorsque $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas,0}$).

	Grandeur	Description	Rôle	Fonctionnement	Valeur
	ψ ★	Indicateur de flamme.	Englober le front de flamme (zones de pré-chauffage + réaction). Définir le mode de fonctionnement (AI/déflag)★.	Créé dans la zone de réaction (en AI ou déflag) et détruit côté GF et GB.	.
	$\psi_{burntgas}$ ★	Indicateur de gaz brûlés.	Marquer les régions GB, de façon à éliminer le facteur d'épaississement dans le sillage du front.	Créé dans la zone de réaction (mode AI seulement), diffuse "librement" dans les gaz brûlés.	.
	$\dot{\omega}_{\psi}^{+}$ ★	Terme de création de ψ dans le front d'AI/Flamme	Relaxer ψ vers 1.0 (AI) ou ψ_0 (déflag) en une durée : $\mathcal{R}_{Flamme} T_{flamme}$ (AI)★ $5\Delta t$ (déflag)	Terme activé lorsque : $S_{NF} > 0.8$ $c > c_{seuil}$ ★	$\dot{\omega}_{\psi}^{+} _{AI} = \frac{\psi_0 - \psi}{\psi_0 (\mathcal{R}_{flamme} \times T_{flamme})}$ ★ $\dot{\omega}_{\psi}^{+} _{déflag} = \frac{\psi_0 - \psi}{5\Delta t}$
	$\dot{\omega}_{\psi}^{-} _{GF/GB}$ ★	Terme de destruction de ψ côté GF/GB	Relaxer ψ vers 0 côté GF/GB	Terme activé lorsque : $S_{NF} < 0.05$ $T < T_{switch}$ (GF) $T > T_{switch}$ (GB)	$\dot{\omega}_{\psi}^{-} _{GF} = \frac{0 - \psi}{\tau_{cold}}$ $\dot{\omega}_{\psi}^{-} _{GB} = \frac{0 - \psi}{\tau_{hot}}$
	$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{+}$ ★	Terme de création de $\psi_{burntgas}$	Marquer les gaz brûlés	Terme activé lorsque : $\psi > 1.0$ $S_{NF} > 0.8$ $c > c_{seuil}$	$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{+} = \frac{\psi_{burntgas,0} - \psi_{burntgas}}{5\Delta t}$
	$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{-}$ ★	Terme de destruction de $\psi_{burntgas}$	Relaxer $\psi_{burntgas}$ vers 0 côté GF	Terme activé lorsque : $c < c_{seuil}$	$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{-} _{GF} = \frac{0 - \psi_{burntgas}}{5\Delta t}$
	S_{NF} ★	Senseur de réaction.	Marquer la zone de réaction du front de flamme.	Compare le dégagement de chaleur à une valeur prédéfinie/tabulée.	$S_{NF} = \max \left[\min \left(\beta \frac{ \dot{\omega}_k _{max}}{ \dot{\omega}_k _{D}} - 1, 1 \right), 0 \right]$
	\hat{S} ★	Senseur de flamme final	Marquer la région où le facteur d'épaississement doit s'appliquer	Découle d'un filtrage de l'indicateur ψ	$\hat{S} = \min(\psi, 1)$ ★
	ψ_0 ★	Valeur plafond de ψ	Définir la valeur atteinte par ψ dans le front de flamme épaisse	Valeur fixe	$\psi_0 = 20.0$
	$\psi_{burntgas,0}$ ★	Valeur plafond de $\psi_{burntgas}$	Définir la valeur seuil de $\psi_{burntgas}$ dans le front de flamme épaisse	Valeur fixe	$\psi_{burntgas,0} = 2.0$
	ψ_{seuil} ★	Valeur seuil de $\psi_{burntgas}$	Définir la valeur seuil de $\psi_{burntgas}$ imposant le changement de valeur de β dans le sillage du front	Valeur fixe	$\psi_{burntgas,0} = 0.05$
	β ★	Paramètre de sensibilité de S_{NF}	Définir la sensibilité du seuil de réaction S_{NF}	Change de valeur selon le mode de fonctionnement (AI/déflag)	$\beta_{AI} = 100.0$ ★ $\beta_{déflag} = 4.0$
	c_{seuil} ★	Seuil d'avancement	Conditionner les termes $\dot{\omega}_{\psi}^{+}$ $\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{+}$ $\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{-}$	Valeur fixe	$c_{seuil} = 0.50$.

TABLE 5.1 – Tableau récapitulant les paramètres essentiels de TFM-M/2.

★ : Terme identique par rapport à TFM-M0
 ★ : Terme modifié par rapport à TFM-M0
 ★ : Terme ajouté par rapport à TFM-M0

	Grandeur	Description	Rôle	Fonctionnement	Valeur
	ψ ★	Indicateur de flamme.	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	.
	$\psi_{burntgas}$ ★	Indicateur de gaz brûlés.	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	.
	$\dot{\omega}_{\psi}^{+}$ ★	Terme de création de ψ dans le front d'AI/flamme	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	.
	$\dot{\omega}_{\psi}^{-} GF$ ★	Terme de destruction de ψ côté GF	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	$\dot{\omega}_{\psi}^{-} GB$ ▲	Terme de destruction de ψ côté GB	Idem TFM-M2	Terme activé lorsque : $S_{NF} < 0.05$ $T > T_{switch}$ $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^*$ ▲	$\dot{\omega}_{\psi}^{-} _{GB} = 0$ (AI)▲ $\dot{\omega}_{\psi}^{-} _{GB} = \frac{0-\psi}{\tau_{hot}}$ (de-Flag)
	$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{+}$ ★	Terme de création de $\psi_{burntgas}$	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}}^{-}$ ★	Terme de destruction de $\psi_{burntgas}$	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	S_{NF} ★	Senseur de réaction.	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	\hat{S} ★	Senseur de flamme final	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	ψ_0 ★	Valeur plafond de ψ	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	$\psi_{burntgas,0}$ ★	Valeur plafond de $\psi_{burntgas}$	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	$\psi_{seuil}^{burntgas}$ ★	Valeur seuil de $\psi_{burntgas}$	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	β ★	Paramètre de sensibilité de S_{NF}	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2
	c_{seuil} ★	Seuil d'avancement	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2	Idem TFM-M2.

 TABLE 5.2 – Tableau récapitulant les paramètres essentiels de TFM-M2_{destr}.

★ : Terme identique par rapport à TFM-M0

☆ : Terme modifié par rapport à TFM-M0

✱ : Terme ajouté par rapport à TFM-M0

▲ : Terme modifié par rapport à TFM-M2

5.5.6 Évaluation des modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr}

L'approche TFM-M0 entraîne un allongement significatif des délais d'AI. Cet allongement parvient à être atténué par TFM-M1, via l'introduction d'un critère d'avancement c_{seuil} portant sur le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} . Toutefois, une augmentation des délais subsiste, et l'utilisation de TFM-M1 en conditions LES moteur 3D paraît inadaptée (section 5.5.4). En réponse à cela, les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} ont été développés afin de représenter une propagation de flamme épaissie, tout en éliminant l'allongement des délais d'AI. Ils s'appuient pour cela sur un temps de relaxation du facteur d'épaississement, basé sur un temps de flamme épaissie. Ces modèles sont testés sur les cas A15 à B60.

Les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} étant proches dans leur conception et les résultats qu'ils fournissent, seuls les résultats issus de TFM-M2_{destr} sont détaillés, par souci de simplicité. Toutefois, une étude de sensibilité au paramètre de relaxation $\mathcal{R}_{flametime}$ est réalisée, et la réponse du modèle TFM-M2 est étudiée au même titre que celle de TFM-M2_{destr}. Cette étude révèle notamment une meilleure robustesse de TFM-M2_{destr} (section 5.5.6.4). La capacité de TFM-M2 et TFM-M2_{destr} à représenter la transition AI→déflagration pour différentes valeurs de $\mathcal{R}_{flametime}$ est alors discutée. Un étude de sensibilité au maillage est également réalisée. La capacité des modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} à dégénérer vers les calculs de référence est discutée.

5.5.6.1 Grandeurs moyennes

Identiquement aux résultats issus TFM-M1, les résultats de TFM-M2_{destr} sont discutés en termes de dégagement de chaleur Fig.5.29, et de température moyenne Fig.5.28. Cependant, un conditionnement $\phi < 2.0$ est appliqué aux résultats de dégagement de chaleur Fig.5.29b, 5.29d, 5.29f et 5.29h afin de discriminer la contribution des branches riche (côté pilote) et pauvre (côté méthane). La valeur de $\phi = 2.0$ est choisie car elle représente la limite de supérieure validité de la définition de l'avancement, évaluée à $\phi \approx 2.0$ (discussion en section 5.5.4.1). Dans la suite, $t_{trans}^{M2/M2_{destr}}$ représente l'instant auquel le modèle TFM-M2/M2_{destr} passe du mode AI au mode déflagration, et $t_{fusion}^{M2/M2_{destr}}$ l'instant à partir duquel le dégagement de chaleur du calcul TFM-M2/M2_{destr} fusionne avec celui du calcul de référence. Un tableau récapitulant les délais d'AI (HTC), les temps de transition vers le mode déflagration $t_{trans}^{M2/M2_{destr}}$, et les temps de fusion TFM/référence $t_{fusion}^{M2/M2_{destr}}$ est présenté en Tab.5.3.

Comportements limites AI/déflagration : Pour les cas A15 à B60, TFM-M2_{destr} reproduit le comportement du calcul de référence durant l'AI, Fig.5.29. En effet, aucun allongement des délais d'AI de flamme chaude n'est remarqué. La stratégie de TFM-M2_{destr} visant à maintenir un facteur d'épaississement proche de 1.0 durant l'AI, au moyen d'un temps de relaxation vers \mathcal{F}_{target} , semble donc capable de préserver le comportement de l'AI de toute influence du facteur d'épaississement. En outre, la propagation de flamme épaissie génère un dégagement de chaleur semblable au calcul de référence, lorsque le régime de déflagration est établi. Le fonctionnement bimodal (AI/déflagration) permet également de reproduire les caractéristiques principales du modèle TFM-M0, à savoir un épaississement englobant les zones de pré-chauffage et de réaction Fig.5.27.

Cependant, l'activation du mode déflagration s'accompagne d'un accroissement temporaire (ou "sursaut") de dégagement de chaleur, respectivement situé autour de $t = 2.5\text{ms}$, $t = 3.0\text{ms}$ et $t = 0.7\text{ms}$, pour A15, B15, et A60, Fig.5.29a, 5.29c et 5.29e. Ainsi, le dégagement de chaleur des calculs TFM-M2_{destr} (ou TFM-M2) ne fusionne pas avec celui des calculs de référence lors du passage au mode déflagration $t_{trans}^{M2/M2_{destr}}$, mais à un instant ultérieur $t_{fusion}^{M2/M2_{destr}}$.

L'accroissement de dégagement de chaleur accompagnant le passage au mode déflagration ($t_{fusion}^{M2/M2_{destr}}$) est attribué à l'intensification des effets diffusifs à travers le front de flamme épaissie. Cela entraîne une amplification des effets de mélange (notamment riche/pauvre) dans la zone stratifiée, tout comme pour les calculs TFM-M1 (section 5.5.4), ce qui affecte le dégagement de chaleur. Ces effets de mélange s'illustrent notamment par un étalement spatial du pic de température proche-stœchiométrique Fig.5.30a à 5.30d. À noter toutefois que pour B60 Fig.5.29g, l'activation du mode déflagration entraîne une diminution brutale du dégagement de chaleur autour de $t = 2.3\text{ms}$.

Dans ce cas précis, la sous-résolution du front antérieure à $t_{trans}^{M2/M2_{destr}}$ induit une surestimation du dégagement de chaleur plus importante que l'intensification des phénomènes diffusifs liés à la transition vers le mode déflagration.

Pour les cas A15, B15, et A60 Fig.5.28a à 5.28c la surestimation de dégagement de chaleur des calculs TFM-M2_{destr} est similaire à celle générée par TFM-M1 Fig.5.16a à 5.16c, malgré l'application plus tardive du facteur d'épaississement due au temps de relaxation vers \mathcal{F}_{target} . Par ailleurs, cet effet est relativement indépendant du paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$, puisque les valeurs de $\mathcal{R}_{flametime}$ supérieures impliquant des temps de relaxation plus longs, n'atténuent pas significativement la surestimation de la température moyenne. De plus, une augmentation des temps de relaxation vers \mathcal{F}_{target} favorise les effets de sous-résolution, ce qui peut également entraîner une surestimation de dégagement de chaleur liée à une mauvaise estimation de la vitesse de déplacement du front (section 5.5.6.3). Cela est particulièrement visible pour B60 Fig.5.29g, dont la propagation sous-résolue et prolongée du front de flamme (branche pauvre) entraîne une forte surestimation du dégagement de chaleur Fig.5.28d. L'augmentation du temps de relaxation n'apparaît donc pas une solution viable pour éviter "le sursaut" de dégagement de chaleur lié à la transition vers le mode déflagration.

Temps de transition vers le mode déflagration : Le modèle TFM-M2_{destr} repose sur un temps de relaxation permettant à l'épaississement de passer d'une valeur de 1.0 à une valeur nominale \mathcal{F}_{target} permettant la résolution d'un front de flamme. Aussi, ce temps de relaxation est supposé permettre l'établissement d'un front de flamme épaissi, tout en respectant un relatif équilibre diffusion/réaction (hypothèse n°2). Finalement, ce temps est supposé comparable à un temps de flamme épaissie \mathcal{T}_{flamme} . Aucun bilan diffusion/réaction n'est effectué sur les calculs TFM-M2_{destr} en raison de phénomènes de sous-résolution du front aux premiers instants de la transition vers le mode déflagration empêchant le calcul des termes diffusifs et réactifs. Toutefois, l'hypothèse n°2 peut être considérée validée en pratique, puisque les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} permettent l'établissement d'un profil de flamme épaissie : (i) sans retarder l'apparition de l'AI, (ii) sans entraîner une chute du dégagement de chaleur analogue à celle notée pour TFM-M1 (section 5.5.4.1)

Pour les cas A15, B15, A60, et B60 ($\Delta_x = 100\mu\text{m}$ et $\mathcal{R}_{flametime} = 0.20$) l'AI survient respectivement autour de $t = 2.2\text{ms}$, $t = 1.7\text{ms}$, $t = 0.5\text{ms}$ et $t = 0.5\text{ms}$, et la transition vers le mode déflagration ($t_{trans}^{M2/M2_{destr}}$) autour de $t = 2.8\text{ms}$, $t = 3.0\text{ms}$, $t = 0.6\text{ms}$, $t = 2.3\text{ms}$ Tab.5.3. Ainsi, la durée séparant l'AI ($t_{AI}^{M2_{destr}}$) et la transition vers le mode déflagration ($t_{trans}^{M2_{destr}}$) est notée $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$, et s'exprime comme Eq.(5.11) :

$$\tau_{trans}^{M2_{destr}} = t_{trans}^{M2_{destr}} - \underbrace{t_{AI}^{M2_{destr}}}_{\text{en pratique égal à } t_{AI}^{ref}} \quad (5.11)$$

Ainsi, les cas A15, B15, A60, B60 représentent respectivement des temps de transition de $\tau_{trans}^{M2_{destr}} = 0.3\text{ms}$, $\tau_{trans}^{M2_{destr}} = 1.5\text{ms}$, $\tau_{trans}^{M2_{destr}} = 0.2\text{ms}$ et $\tau_{trans}^{M2_{destr}} = 1.8\text{ms}$. Ainsi, les durées de transition sont très disparates d'un cas à l'autre, mais sont toutefois comparables à un temps de flamme épaissie, de l'ordre de $\mathcal{T}_{flamme} \approx 1.0\text{ms}$ pour les cas A15 à B60 présents. La disparité des temps de transitions s'explique notamment par celle des temps de flammes épaissies, variant typiquement entre 0.5ms et 2.0ms dans les conditions stratifiées présentes.

À noter toutefois que le cas B60 Fig.5.29h semble afficher une transition vers le mode déflagration relativement tardive par rapport aux autres cas. L'origine de cela n'est pas déterminée avec certitude. Toutefois, la forte réactivité du cas B60 génère des ondes de pression (de l'ordre de 6bar) à travers le domaine, perturbant la propagation du front de réaction et le dégagement de chaleur associé. Cela affecte la détection du front par \mathcal{S}_{NF} , et donc la création de ψ permettant l'accroissement du facteur d'épaississement. Bien que difficile à démontrer avec certitude, la transition tardive pour B60 est attribuée à la perturbation des taux de réaction due aux ondes de pression traversant le domaine.

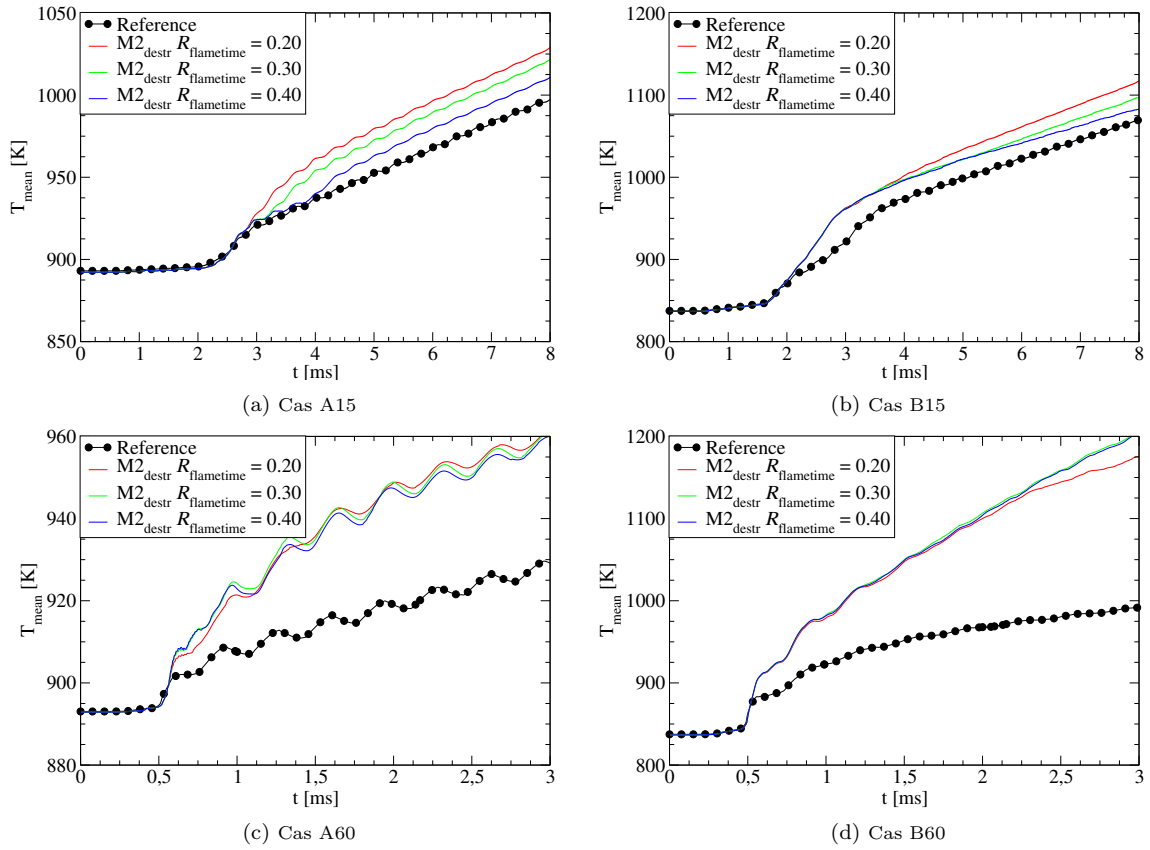


FIGURE 5.28 – Comparaison en température moyenne entre les calculs de référence et les calculs TFM- $M2_{\text{destr}}$ sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$. Le modèle $M2_{\text{destr}}$ génère une surestimation de la température moyenne.
 Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{\text{target}}|_{st} = 50$, $\mathcal{F}_{\text{target}}|_{Z_{MR}} = 30$, $\mathcal{F}_{\text{target}}|_{CH_4} = 20$.
 Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{\text{target}}|_{st} = 120$, $\mathcal{F}_{\text{target}}|_{Z_{MR}} = 70$, $\mathcal{F}_{\text{target}}|_{CH_4} = 60$.

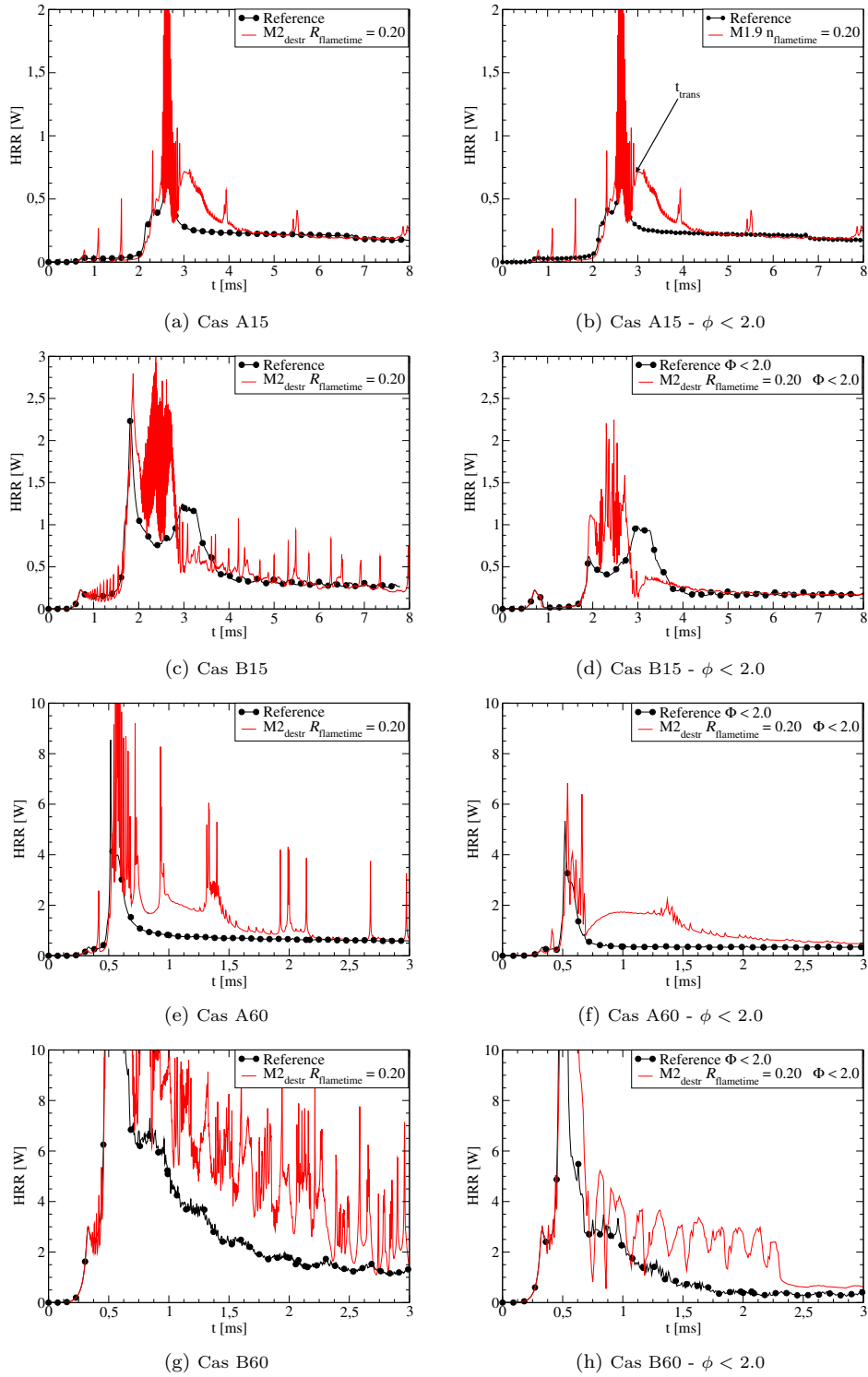


FIGURE 5.29 – Comparaison en dégagement de chaleur (gauche : non conditionné ; droite : conditionné par $\phi < 2.0$ *i.e.* branche pauvre) entre les calculs de référence et les calculs TFM- $M2_{destr}$ sur un maillage $\Delta x = 100\mu m$. Les délais d'AI de référence sont reproduits par $M2_{destr}$ mais un "sursaut" de dégagement de chaleur lors de l'activation du mode déflagration apparaît pour A15, B15, A60 5.29b, 5.29d et 5.29f.
 Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target|st} = 50$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 30$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 20$.
 Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target|st} = 120$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 70$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 60$.

5.5.6.2 Influence du maillage

TFM-M2_{destr} est testé sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$ Fig.5.31 et 5.32. La description de l'AI par le modèle n'affiche aucune sensibilité à la variation de résolution opérée. Les délais d'AI des calculs de référence sont reproduits, et aucun retard analogue à ceux remarquées pour TFM-M1 n'est remarqué, malgré des temps relaxations vers \mathcal{F}_{target} raccourcis par rapport au maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$. L'augmentation de la résolution ($\Delta_x = 100\mu\text{m} \rightarrow \Delta_x = 50\mu\text{m}$) s'accompagne d'une diminution des facteurs d'épaississement Tab.5.3, et donc des temps de flammes épaissies associés ($\mathcal{T}_{flamme} = \mathcal{F}\delta_L/S_L$). De même, un raccourcissement des temps de relaxation vers \mathcal{F}_{target} apparaît pour le maillage plus fin. Cela est attribué au raccourcissement des temps de flammes Eq.(5.4), et suggère un fonctionnement cohérent du modèle TFM-M2_{destr}.

Ainsi, pour $M2_{destr} - \mathcal{R}_{flametime} = 0.20$ Fig.5.31, le passage du mode AI au mode déflagration $t_{trans}^{M2/M2_{destr}}$ est mis en évidence par un accroissement du dégagement de chaleur, et s'effectue pour les cas A15, B15, A60 et B60 respectivement autour de $t = 2.6\text{ms}$, $t = 2.5\text{ms}$, $t = 0.6\text{ms}$ et $t = 0.6\text{ms}$. Ces temps de transitions sont approximativement deux fois inférieurs à ceux rencontrés pour le maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ Fig.5.29, à l'exception du cas B60 Fig.5.31h. Toutefois, le cas B60 semble afficher une transition tardive sur le maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ Fig.5.29h, vraisemblablement en raison d'ondes de pression. Le comportement du modèle sur le cas B60 est donc délicat à interpréter.

En outre, le pic de température proche-stœchiométrique subit un étalement environ deux fois inférieur pour $\Delta_x = 50\mu\text{m}$ que pour $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ Fig.5.30, ce qui est proportionnel aux facteurs d'épaississement appliqués. L'augmentation de la résolution diminue significativement les effets de mélange riche/pauvre à l'origine d'une surestimation de la température moyenne Fig.5.28 et 5.32.

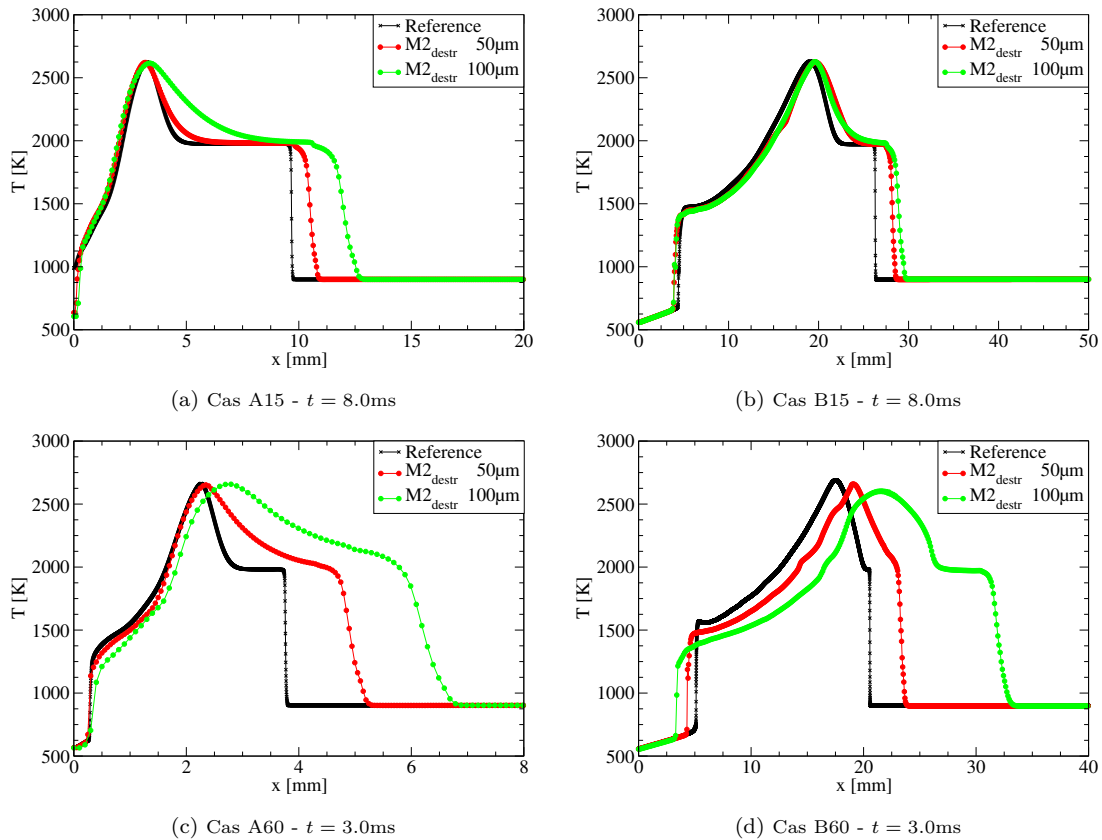


FIGURE 5.30 – Comparaison spatiale des profils de température pour le calcul de référence, et TFM-M2_{destr} appliqué à des maillages $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 50\mu\text{m}$.

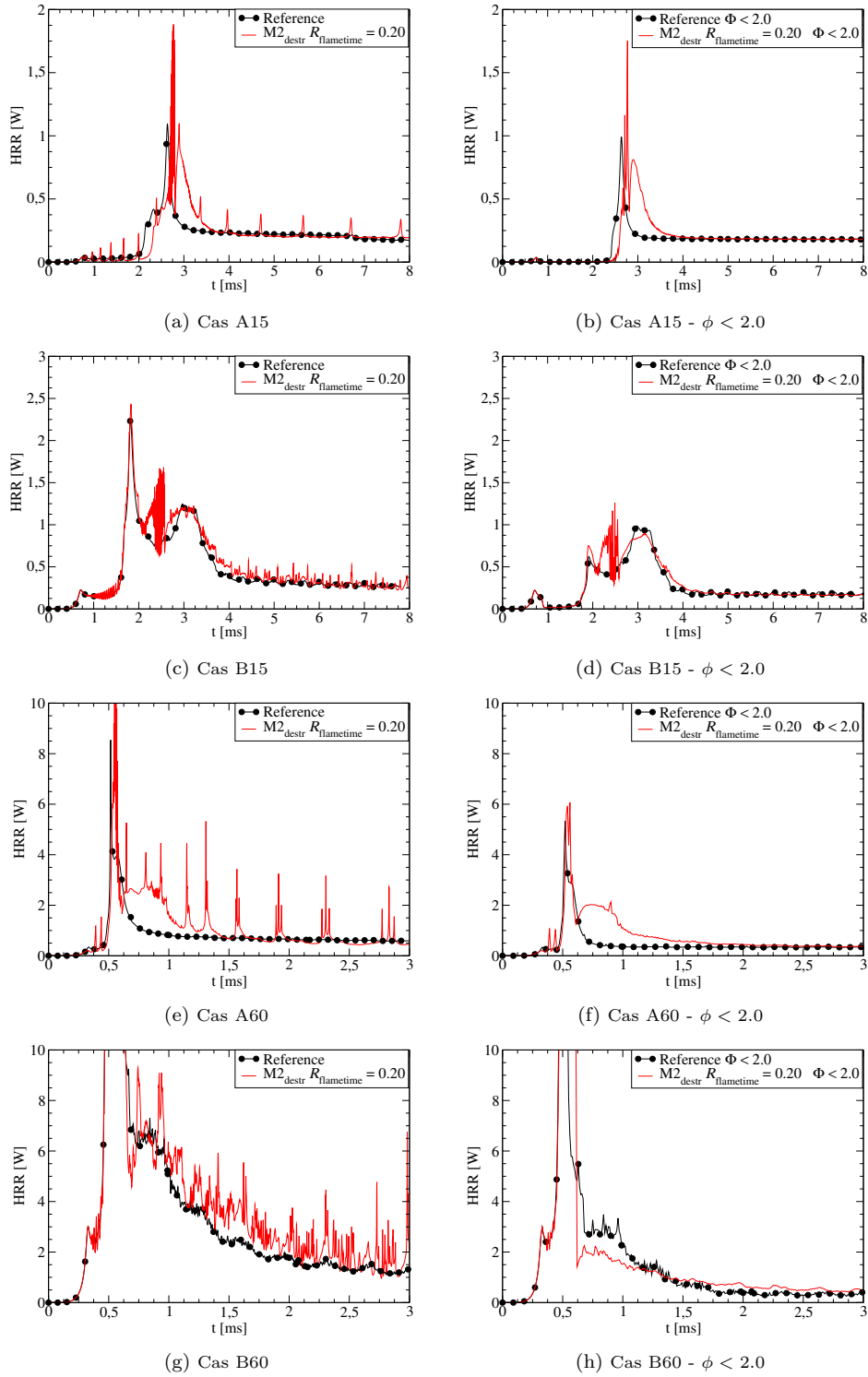


FIGURE 5.31 – Comparaison en dégagement de chaleur (gauche : non conditionné ; droite : conditionné par $\phi < 2.0$ *i.e.* branche pauvre) entre les calculs de référence et les calculs TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$. Les délais d'AI de référence sont reproduits par M2_{destr}. Le "sursaut" de dégagement de chaleur accompagnant l'activation du mode déflagration est atténué par rapport au maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ Fig.5.29.

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target|st} = 25$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 15$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 10$.

Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target|st} = 60$, $\mathcal{F}_{target|Z_{MR}} = 35$, $\mathcal{F}_{target|CH_4} = 30$.

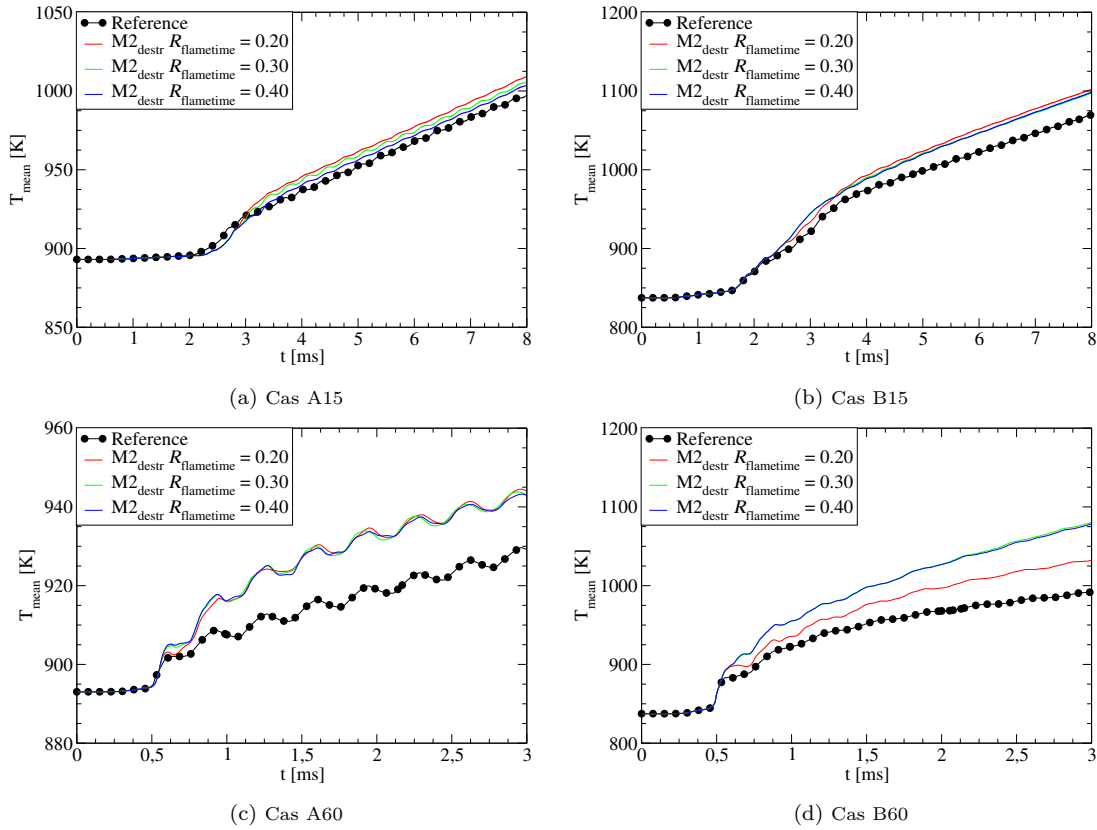


FIGURE 5.32 – Comparaison en température moyenne entre les calculs de référence et les calculs TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$. Le modèle M2_{destr} génère une surestimation de la température moyenne, toutefois atténuée par rapport au maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ Fig.5.28.

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 25$, $\mathcal{F}_{target}|_{ZMR} = 15$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 10$.
 Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 60$, $\mathcal{F}_{target}|_{ZMR} = 35$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 30$.

5.5.6.3 Influence du paramètre de relaxation $\mathcal{R}_{flametime}$

Le paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ pilote le temps nécessaire à TFM-M2 et TFM-M2_{destr} pour atteindre l'épaisseur nominale \mathcal{F}_{target} , et donc passer du mode AI au mode déflagration. La sensibilité à ce paramètre de relaxation est testée sur M2_{destr} avec des valeurs $\mathcal{R}_{flametime} = 0.2, 0.3$ et 0.4 . À noter que ces valeurs sont choisies empiriquement car permettant globalement de reproduire les délais d'AI et la transition vers le mode déflagration. Elles n'admettent donc pas de justification théorique. Le paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ n'influence pas le comportement limites AI/déflagration mais joue ainsi un rôle sur le phasage, et la durée de la transition vers le mode déflagration $\tau_{trans}^{M2/M2_{destr}}$. Comme visible pour le cas A15 - $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ Fig.5.33a à 5.33c, l'augmentation de $\mathcal{R}_{flametime}$ retarde la transition vers le mode déflagration mise en évidence par un accroissement temporaire ("sursaut") de dégagement de chaleur. De même, la propagation sous-résolue dure plus longtemps pour des $\mathcal{R}_{flametime}$ supérieurs.

Une analyse de sensibilité au paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ basée sur le temps de transition $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$ est réalisée Fig.5.34. Afin de comparer la réponse du modèle pour les différents cas, les temps de transition vers le mode déflagration $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$ sont adimensionnés par la valeur prise pour $\mathcal{R}_{flametime} = 0.2$. Toutefois, seuls les cas A15, B15, et A60 sont représentés car le modèle B60 n'assure pas la transition pour des valeurs supérieures à $\mathcal{R}_{flametime} = 0.20$. Les temps de transition idéaux sont également présentés, et comparés aux temps relevés dans les calculs TFM-M2_{destr}. En d'autres termes la courbe "Ideal" permet de comparer l'accroissement des valeurs $\mathcal{R}_{flametime}$ à l'accroissement des valeurs $\tau_{trans}^{M2/M2_{destr}}$ observées et donc de vérifier la proportionnalité entre ces deux grandeurs, et donc la réponse du modèle.

Pour le maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$, l'accroissement du paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ génère des temps de transition

$\tau_{trans}^{M2/M2_{destr}}$ surestimés d'un facteur 1.5 à 2.0 par rapport aux temps idéaux, et ce pour l'ensemble des cas Fig.5.34a. Pour le maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$, les temps de transition suivent davantage la trajectoire idéale, suggérant un meilleur comportement du modèle Fig.5.34b.

Les temps de transition d'un régime d'AI à un régime de déflagration observés dans les calculs de référence (τ_{trans}^{ref}) sont compris entre 0.3ms et 0.8ms, tandis que les valeurs $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$ relatives aux calculs TFM-M2_{destr} sont globalement de l'ordre de 1.0ms Tab.5.3 (exception faite de B60, section 5.5.6.1). Les temps de transition des calculs de référence sont donc comparables à ceux issus de TFM-M2_{destr}, suggérant une certaine représentativité de la physique "réelle" et donc la cohérence du modèle.

Toutefois, une comparaison au cas par cas révèle de forts écarts entre τ_{trans}^{ref} et $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$, pouvant aller jusqu'à un facteur 5 Tab.5.3 :

Pour B15, $\tau_{trans}^{ref} = 0.8\text{ms}$ tandis que $\tau_{trans}^{M2_{destr}} = 4.3\text{ms}$ pour $\mathcal{R}_{flametime} = 0.4$ et $\Delta_x = 100\mu\text{m}$. De même pour A60, $\tau_{trans}^{ref} = 0.5\text{ms}$ tandis que $\tau_{trans}^{M2_{destr}} = 0.1\text{ms}$ pour $\mathcal{R}_{flametime} = 0.2$ et $\Delta_x = 50\mu\text{m}$.

Les temps de transition vers le mode déflagration $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$ ne sont donc pas nécessairement proches des temps de transitions AI→déflagration τ_{trans}^{ref} exhibés par les calculs de référence, bien qu'ils en respectent l'ordre de grandeur. La représentativité de la physique de la transition AI→déflagration offerte par TFM-M2_{destr} est donc à mitiger.

En effet, les temps de transition vers le mode déflagration sont basés sur un temps de flamme épaissie, tandis que les temps de transition AI→déflagration "réels" des calculs de référence sont pilotés par l'établissement d'un équilibre diffusion/réaction découlant de phénomènes complexes décrits au chapitre 3 (ralentissement de la vitesse de déplacement du front en raison d'une diminution de la réactivité locale, amincissement du front de réaction, propagation du front de réaction dans des gaz partiellement brûlés...).

Ainsi, approximer le temps de transition AI→déflagration à partir d'une fraction de temps de flamme épaissie ($\mathcal{R}_{flametime} \times \mathcal{T}_{flamme}$) montre donc certaines limitations.

Cependant, bien que les temps $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$ soient significativement affectés par $\mathcal{R}_{flametime}$, les temps de fusion avec la référence t_{fusion} sont peu sensibles à ce paramètre, voir Tab.5.3. Le paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ joue donc un essentiellement un rôle sur la robustesse du modèle (i.e. sa capacité à assurer la transition vers le mode déflagration), et relativement peu sur les résultats des calculs, dès lors que le passage du mode AI au mode déflagration s'opère effectivement.

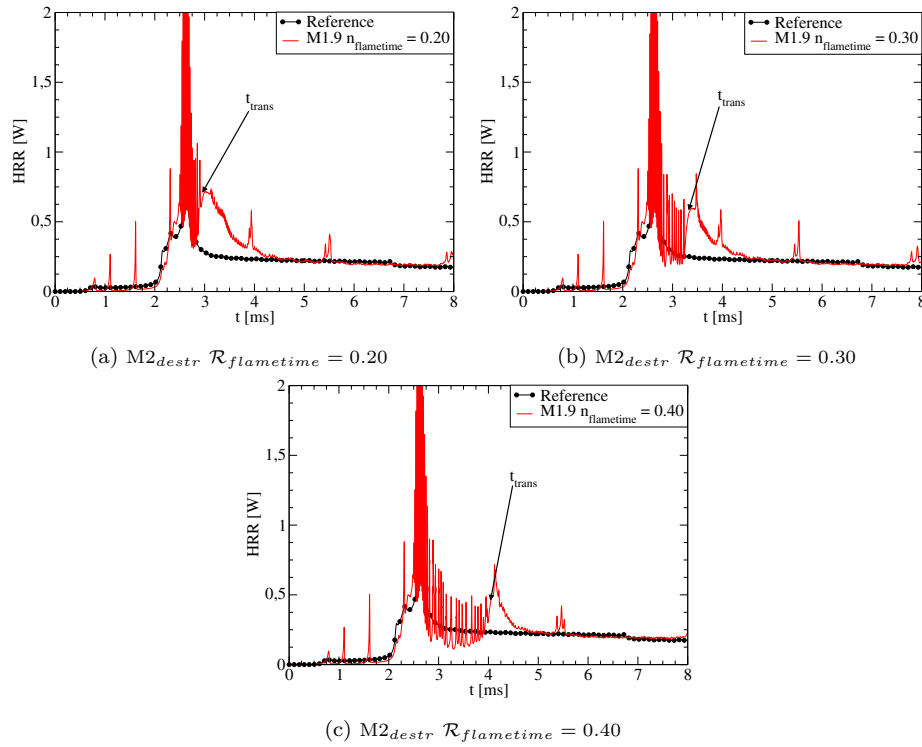
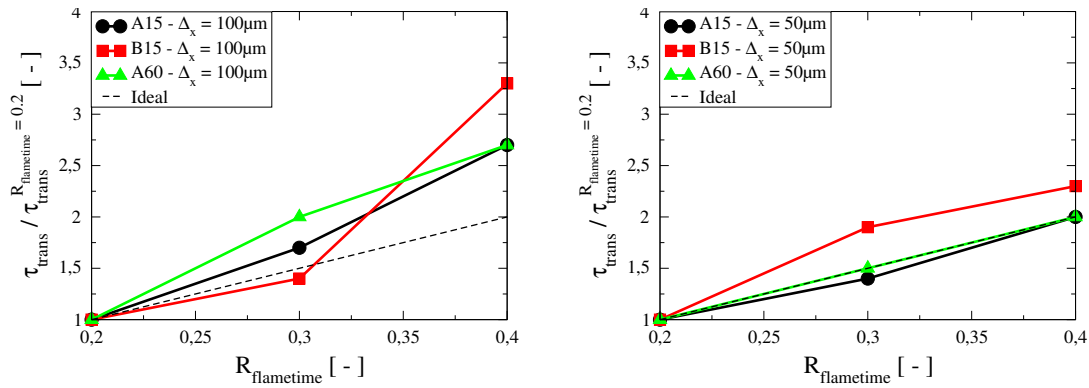


FIGURE 5.33 – Cas A15. Comparaison en dégagement de chaleur entre les calculs de référence et les calculs TFM- $M2_{destr}$ sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$, pour différentes valeurs du paramètre de relaxation $\mathcal{R}_{flametime}$. L'influence du paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ est nulle sur l'AI et sur la propagation de flamme. Seul le temps de transition vers le mode déflagration $\tau_{trans}^{M2/M2_{destr}}$ est affecté.



(a) Influence du paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ pour $\Delta_x = 100\mu\text{m}$. (b) Influence du paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ pour $\Delta_x = 50\mu\text{m}$.

FIGURE 5.34 – Réponse du modèle aux variations du paramètre de relaxation $\mathcal{R}_{flametime}$. Pour $\Delta_x = 100\mu\text{m}$, un allongement des temps de transition $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$ 1.5 à 2.0 fois supérieur à l'accroissement de $\mathcal{R}_{flametime}$ est noté. Pour $\Delta_x = 50\mu\text{m}$, l'allongement des temps $\tau_{trans}^{M2_{destr}}$ est globalement proportionnel à l'accroissement de $\mathcal{R}_{flametime}$, suggérant une réponse adaptée du modèle.

5.5.6.4 Robustesse des modèles M2 et $M2_{destr}$ pour représenter la transition AI→déflagration

Les modèles TFM-M2 et TFM- $M2_{destr}$ affichent des résultats similaires pour des paramètres de relaxation faibles $\mathcal{R}_{flametime} = 0.20 - 0.30$ (pour rappel, les valeurs de 0.2, 0.3, et 0.4 sont choisies de façon empirique, section 5.5.6.1). Toutefois, une valeur plus élevée $\mathcal{R}_{flametime} = 0.40$ souligne une différence de comportement majeure entre TFM-M2 et TFM- $M2_{destr}$ et notamment un défaut récurrent pour TFM-M2 : un problème de non-transition vers le mode déflagration, notamment mis en évidence par des oscillations de dégagement de chaleur, et révélant la sous-résolution prolongée du front Fig.5.35 et 5.37, particulièrement sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$.

Ce problème est corrigé par l'utilisation d'un maillage plus fin $\Delta_x = 50\mu\text{m}$ Fig.5.36 et 5.38, mais constitue une différence notable entre TFM-M2 et TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$, et est donc discuté.

Sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$, le modèle TFM-M2_{destr} présente ainsi une sensibilité au paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ plus faible que TFM-M2 notamment pour $\mathcal{R}_{flametime} = 0.40$. En effet, pour les cas A15, B15, A60, le mode déflagration s'applique respectivement autour de $t = 4.0\text{ms}$, $t = 6.0\text{ms}$ et $t = 0.8\text{ms}$ Fig.5.35b, 5.35d et 5.35f. Cette transition intervient de façon tardive, plus spécialement pour A15 et B15, mais est tout de même assurée par M2_{destr}, contrairement à TFM-M2 Fig.5.35a, 5.35c et 5.35e. Toutefois, pour le cas B60, M2_{destr} pose le même problème de non-transition que TFM-M2 Fig.5.35g et 5.35h. Pour rappel, cela est attribué à la présence d'ondes de pression de forte amplitude (section 5.5.6.1). La robustesse de M2_{destr} paraît donc également perfectible.

Lorsque le paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ est augmenté, le terme de création $\dot{\omega}_\psi^+$ peut dans certains cas devenir trop faible pour assurer un accroissement de ψ dans le front. En d'autres termes, la quantité de ψ créée dans le front est trop faible pour permettre son accroissement (de même que celui du facteur d'épaississement), et donc satisfaire le critère $\psi > 1.0$ permettant le passage au mode déflagration. Ainsi, le choix du paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ a une grande importance puisque des valeurs trop élevées réduisent l'amplitude du terme $\dot{\omega}_\psi^+$ et favorisent les problèmes de non-transition vers le mode déflagration. Cela empêche in fine de représenter la propagation d'un front de flamme épaissie. La criticité du paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ varie cependant entre TFM-M2 et TFM-M2_{destr} :

✓ Pour TFM-M2, en mode AI, les termes de création $\dot{\omega}_\psi^+|_{deflag}$ et de destruction $\dot{\omega}_\psi^-|_{GF}$ et $\dot{\omega}_\psi^-|_{GB}$ entrent en compétition. Or, pour une valeur $\mathcal{R}_{flametime} = 0.40$, le terme $\dot{\omega}_\psi^+|_{deflag}$ est dépassé par les termes $\dot{\omega}_\psi^-|_{GF}$ et $\dot{\omega}_\psi^-|_{GB}$. Cela empêche l'accroissement de ψ dans le front, et donc celle du facteur d'épaississement. La propagation du front de réaction demeure alors sous-résolue, en témoignent les oscillations de dégagement de chaleur pour les cas A15 à B60 (branche pauvre) Fig.5.35a, 5.35c, 5.35e et 5.35g.

L'utilisation d'un maillage plus fin $\Delta_x = 50\mu\text{m}$ Fig.5.36a, 5.36c, 5.36e et 5.36g induit une réduction des facteurs d'épaississement et des temps de flammes épaissies ($\mathcal{T}_{flamme} = \mathcal{F}_{target}(\delta_L/S_L)$), et donc un terme de création $\dot{\omega}_\psi^+|_{deflag}$ supérieur (voir Eq.(5.4)). Cela favorise alors l'accroissement de ψ dans le front et la transition vers le mode déflagration.

✓ Pour TFM-M2_{destr}, en mode AI, le terme de destruction de ψ côté GB $\dot{\omega}_\psi^-|_{GB}$, est désactivé (contrairement à M2). De fait, la compétition entre le terme de création $\dot{\omega}_\psi^+|_{deflag}$ et le terme de destruction $\dot{\omega}_\psi^-|_{GB}$ est inexistante. L'absence de compétition entre $\dot{\omega}_\psi^+|_{deflag}$ et $\dot{\omega}_\psi^-|_{GB}$ favorise alors l'accroissement de ψ et la transition vers le mode déflagration permettant la résolution du front de réaction (et la fin des oscillation de dégagement de chaleur) Fig.5.35b, 5.35d et 5.35f, à l'exception encore une fois du cas B60 Fig.5.35f.

Au regard des résultats présents, l'utilisation du modèle TFM-M2_{destr} et de valeurs de l'ordre de $\mathcal{R}_{flametime} = 0.2$ à 0.3 sont recommandées.

En effet, la configuration TFM-M2_{destr} - $\mathcal{R}_{flametime} = 0.20 - 30$ affiche une certaine généralité permettant de représenter la transition AI→déflagration dans les cas A15 à B60 présents. Or, ces cas impliquent des délais d'AI de l'ordre de $\tau_{AI} \approx 1.0\text{ms}$ et des vitesses de flamme pré-mélangée de l'ordre de $S_L \approx 1.0\text{m/s}$ représentatives de conditions typiques-moteur. La capacité de TFM-M2_{destr} à représenter la transition AI→déflagration sur les cas A15 à B60, permet alors d'envisager l'utilisation du modèle sur une vaste étendue de conditions thermodynamiques, et donc de points de fonctionnement moteur en configuration LES 3D.

En outre, les problèmes de non-transition relevés pour B60 avec $\mathcal{R}_{flametime} = 0.3 - 0.4$ sont à relativiser : Ces derniers sont attribués à la présence d'ondes de pression de l'ordre de 6bar. Or, de telles ondes de pression ne sont a priori pas rencontrées en conditions moteur usuelles (hors cliquetis/détonation), et donc peu problématiques d'un point de vue de l'utilisation du modèle TFM-M2_{destr} en conditions moteur LES 3D. Une étude plus extensive sur d'autres conditions est néanmoins suggérée pour vérifier la généralité de TFM-M2_{destr}.

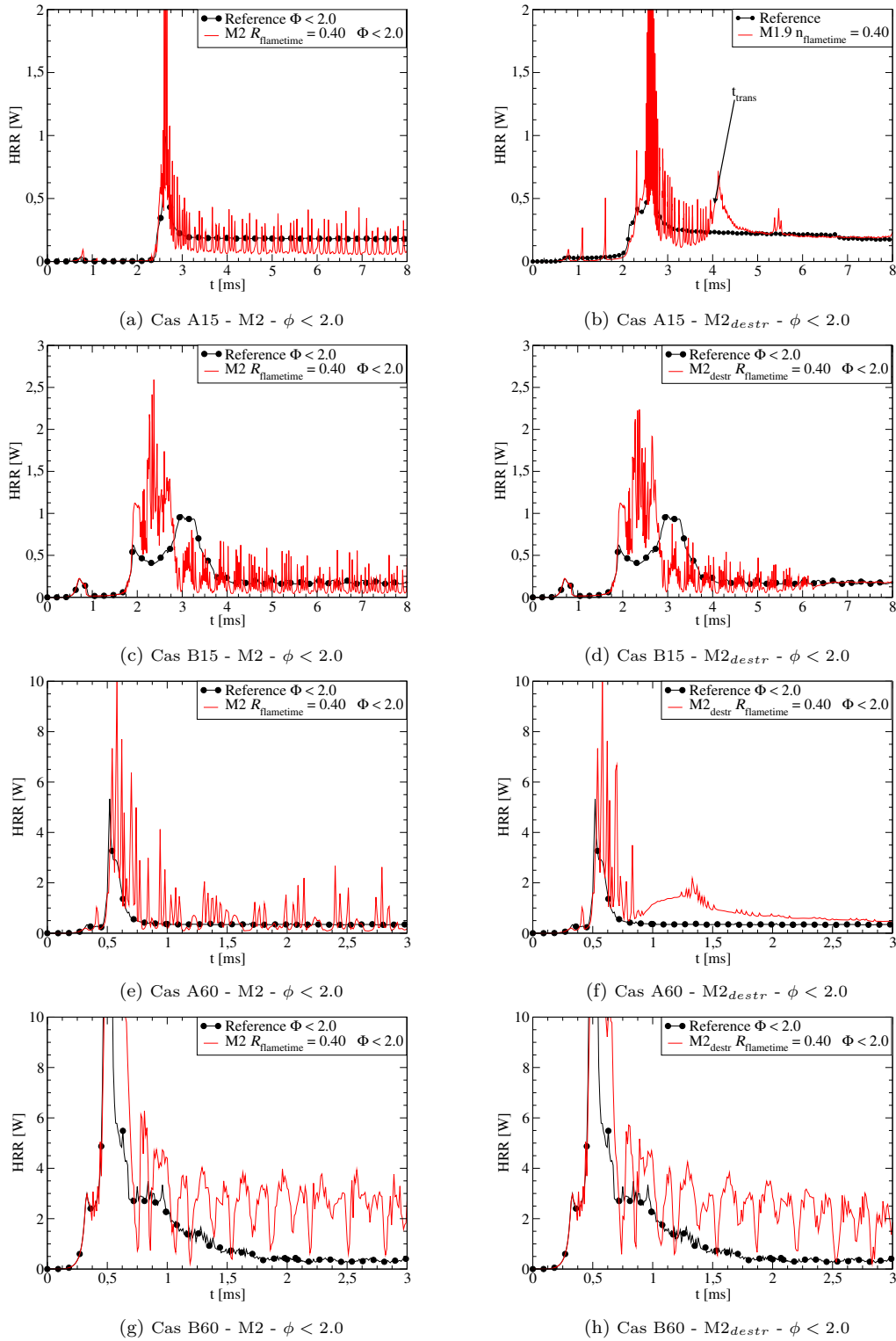


FIGURE 5.35 – Comparaison en dégagement de chaleur entre les calculs de référence et les calculs TFM-M2 et TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta x = 100\mu\text{m}$. Le paramètre de relaxation vaut $\mathcal{R}_{flametime} = 0.40$. M2 n'assure la transition vers le mode déflagration pour aucun cas (front de réaction sous-résolu). M2_{destr} assure cette transition pour A15, B15, A60, et n'échoue que pour B60.

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 25$, $\mathcal{F}_{target}|_{ZMR} = 15$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 10$.

Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 60$, $\mathcal{F}_{target}|_{ZMR} = 35$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 30$.

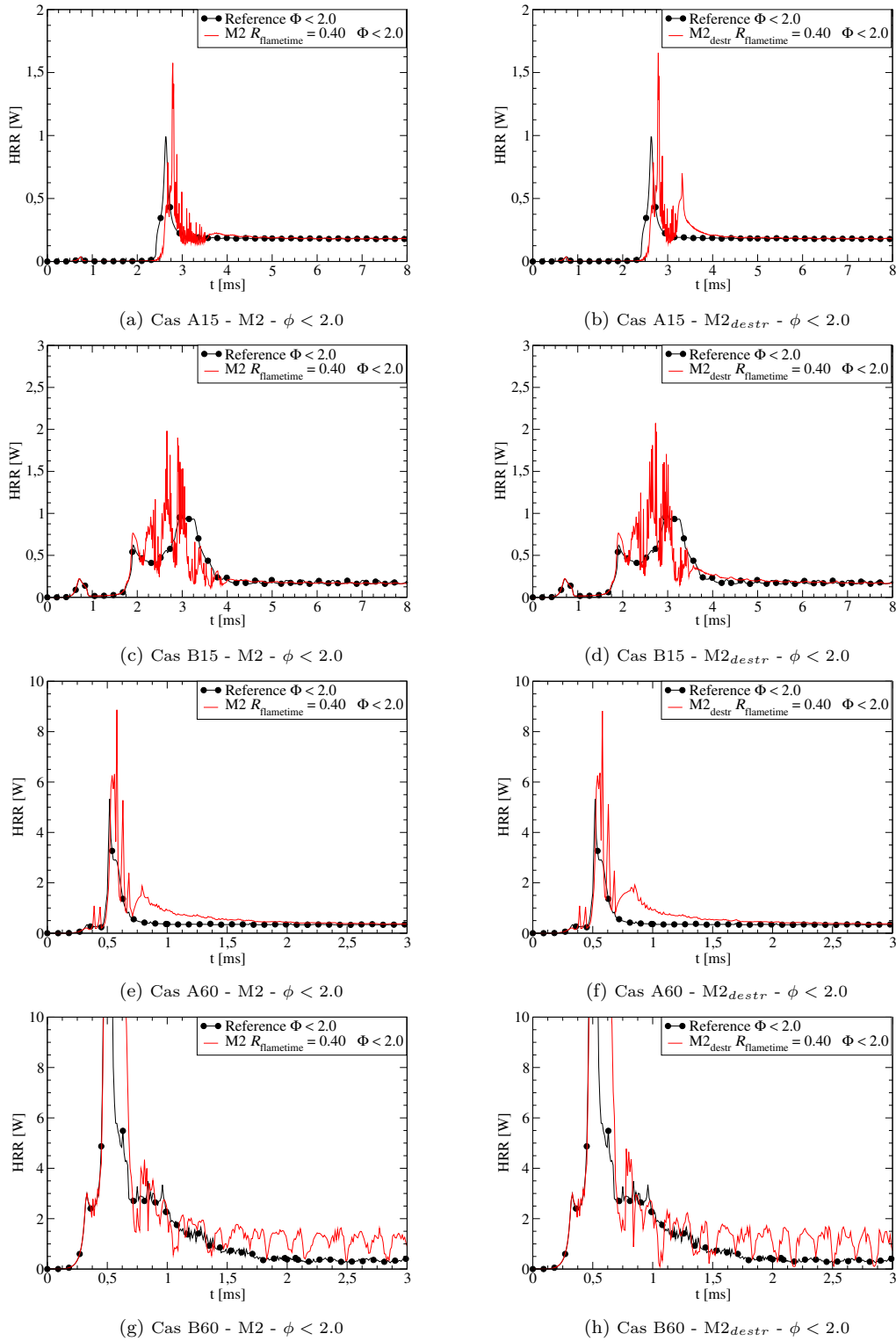


FIGURE 5.36 – Comparaison en dégagement de chaleur entre les calculs de référence et les calculs TFM-M2 et TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$. Le paramètre de relaxation vaut $\mathcal{R}_{flametime} = 0.40$. Sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$, TFM-M2 assure la transition vers le mode déflagration au même titre que M2_{destr}. Sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$, les différences de robustesse entre TFM-M2 et TFM-M2_{destr} sont gommées. Le cas B60 présente toutefois, et à nouveau, un problème de non-transition.

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 25$, $\mathcal{F}_{target}|_{ZMR} = 15$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 10$.

Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 60$, $\mathcal{F}_{target}|_{ZMR} = 35$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 30$.

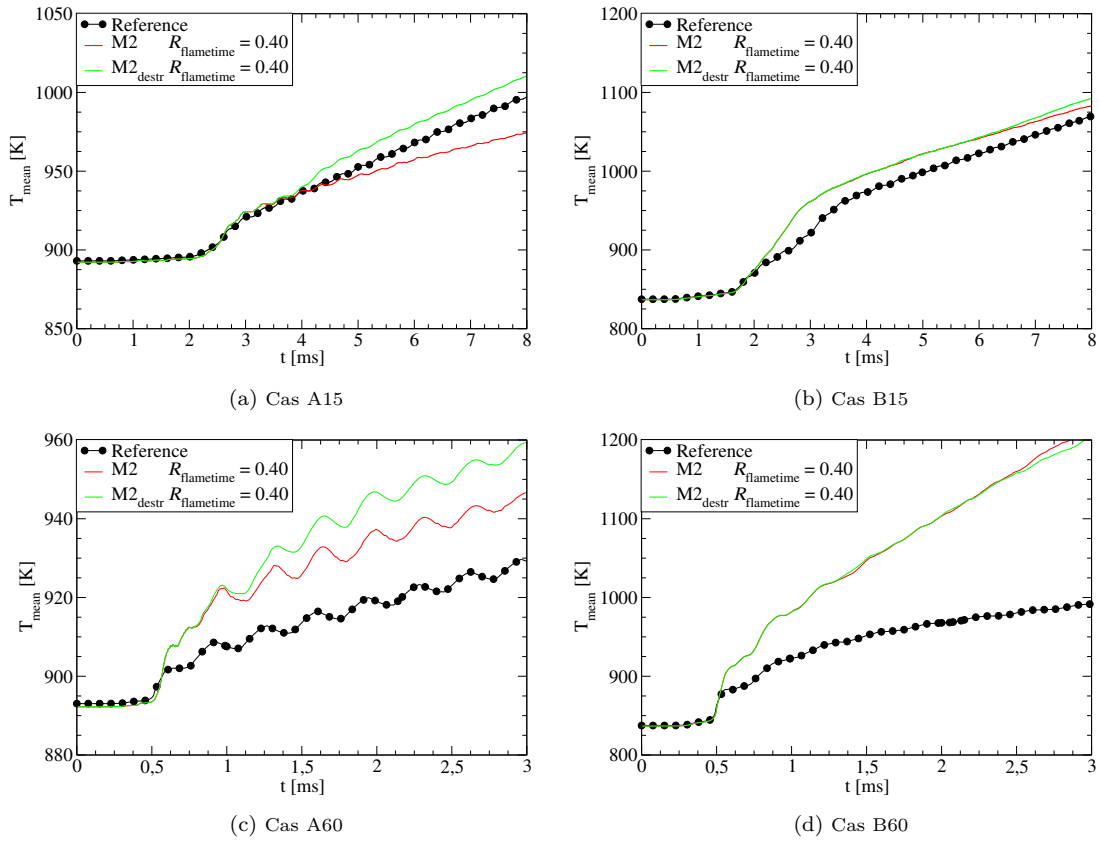


FIGURE 5.37 – Comparaison en température moyenne entre les calculs de référence et les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$. Le paramètre de relaxation vaut $\mathcal{R}_{flametime} = 0.40$. Une surestimation globale de la température moyenne apparaît pour les deux modèles. Pour M2 cela est dû à la sous-résolution du front. Pour M2_{destr}, cela provient de deux contributions : (i) la sous-résolution du front (avant la transition vers le mode déflagration), (ii) les effets de sur-diffusivité imputables au facteur d'épaississement (effets de mélange riche/pauvre).

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 25$, $\mathcal{F}_{target}|_{Z_{MR}} = 15$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 10$.

Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 60$, $\mathcal{F}_{target}|_{Z_{MR}} = 35$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 30$.

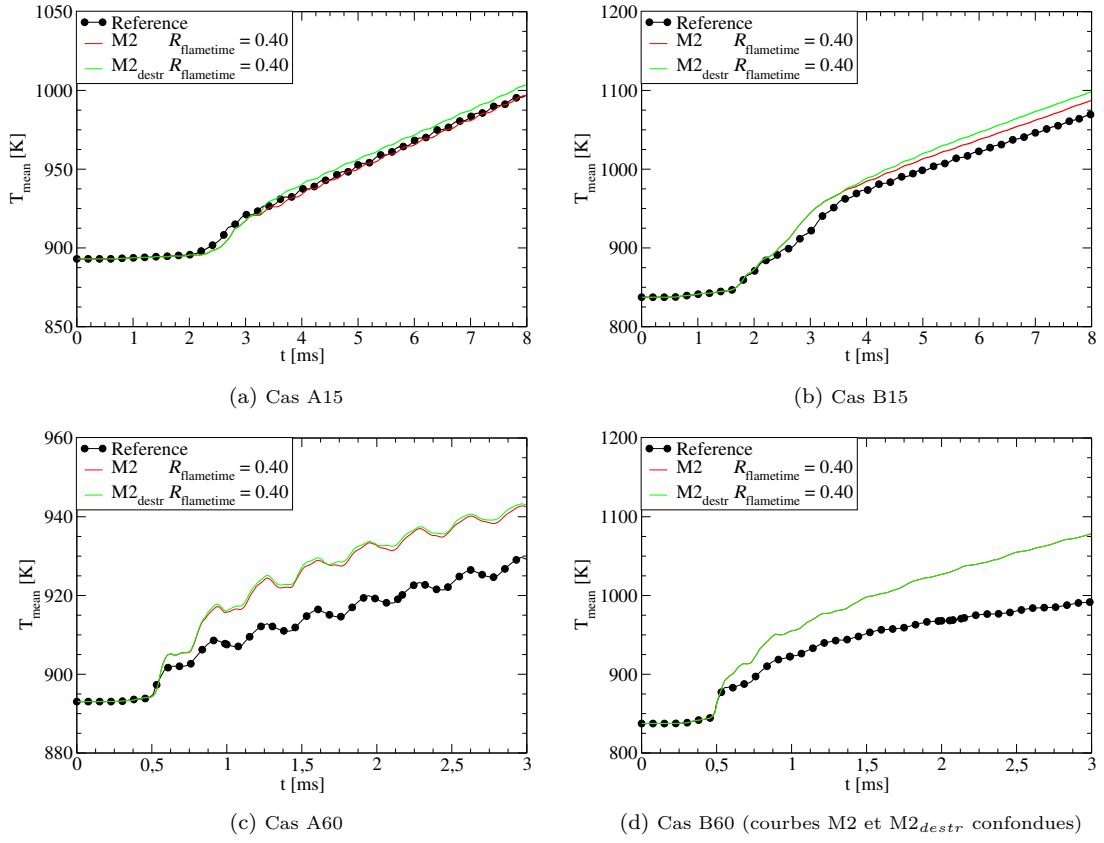


FIGURE 5.38 – Comparaison en température moyenne entre les calculs de référence et les calculs TFM-M2 et TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta_x = 50\mu\text{m}$. Le paramètre de relaxation vaut $\mathcal{R}_{flametime} = 0.40$. Les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} affichent des comportements quasi-identiques. Une surestimation globale de la température moyenne apparait pour les deux modèles, mais de façon atténuée par rapport au maillage $\Delta_x = 100\mu\text{m}$ Fig.5.37.

Pour A15 et B15 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 25$, $\mathcal{F}_{target}|_{Z_{MR}} = 15$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 10$.

Pour A60 et B60 : $\mathcal{F}_{target}|_{st} = 60$, $\mathcal{F}_{target}|_{Z_{MR}} = 35$, $\mathcal{F}_{target}|_{CH_4} = 30$.

Cas	$t_{AI}^{ref} (ms)$	$t_{trans}^{ref} (ms)$	$T_{trans}^{ref} (ms)$
A15	2.2	3.0	0.8
B15	1.7	2.5	0.8
A60	0.5	0.8	0.3
B60	0.5	1.0	0.5

Cas	$t_{AI}^{M2/M2_{destr}} (ms)$	$t_{trans}^{M2} (ms)$			$T_{trans}^{M2} (ms)$			$t_{fusion}^{M2} (ms)$			$t_{destr}^{M2} (ms)$								
		$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$	$\mathcal{R}_{flametime}$							
A15	2.2	3.0 2.8	3.5 3.0	∞ 3.5	2.8 2.7	3.2 2.9	3.8 3.2	0.8 0.6	1.3 1.3	∞ 1.3	0.6 0.5	1.0 0.7	1.6 1.0	5.0 4.1	5.5 4.2	∞ 4.2	5.0 4.0	5.5 4.1	6.0 4.2
B15	1.7	3.0 2.9	4.5 3.2	∞ 4.0	3.0 2.5	3.5 3.2	6.0 3.5	1.3 1.2	2.8 1.5	∞ 2.3	1.3 0.8	1.8 1.5	4.3 1.8	4.0 3.2	5.0 3.5	∞ 3.8	4.0 2.5	4.5 3.5	6.0 4.0
A60	0.5	0.65 0.6	0.8 0.65	∞ 0.70	0.65 0.60	0.8 0.65	0.9 0.70	0.15 0.1	0.3 0.15	∞ 0.2	0.15 0.1	0.3 0.15	0.4 0.2	3.0 2.0	3.0 2.0	∞ 2.0	3.0 2.0	3.0 2.0	3.0 2.0
B60	0.5	∞ 0.7	∞ ∞	∞ ∞	2.3 0.7	∞ ∞	∞ ∞	∞ 0.2	∞ ∞	∞ ∞	1.8 0.2	∞ ∞	∞ ∞	3.0 3.0	∞ ∞	∞ 3.0	∞ 3.0	∞ ∞	∞ ∞

TABLE 5.3 – Tableaux récapitulatifs des temps t_{AI} , t_{trans} , T_{trans} , t_{fusion} observés dans les calculs de référence (haut) et dans les calculs TFM-M2 et TFM-M2 $_{destr}$ (bas).

- t_{AI}^{ref} et $t_{AI}^{M2/M2_{destr}}$ représentent respectivement l'instant auquel survient l'AI (HTC) pour le calculs de référence, et pour les calculs TFM-M2 et TFM-M2 $_{destr}$.
- T_{trans}^{ref} représente la durée nécessaire pour passer d'un régime d'AI à un régime de déflagration sur le calcul de référence, *i.e.* $t_{trans}^{ref} - t_{AI}^{ref}$ (analyse des vitesses de déplacement et de l'épaisseur de flamme réalisée au chapitre 4).
- $T_{trans}^{M2/M2_{destr}}$ représente la durée nécessaire aux calculs TFM-M2 et TFM-M2 $_{destr}$ pour passer d'un régime d'AI, à un régime de déflagration *i.e.* passer au mode déflagration conditionné par le critère $\psi > 1.0$.
- t_{fusion} représente le temps nécessaire au calculs TFM-M2 et TFM-M2 $_{destr}$ pour fusionner avec le calcul de référence, en termes de dégagement de chaleur.

5.5.6.5 Conclusions des modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr}

Dans cette section, les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} reposant sur une modélisation particulière des termes de création/destruction de ψ , ont été appliqués aux cas A15 à B60 sur un maillage de niveau LES, et comparés aux calculs de référence utilisant un maillage de niveau DNS.

Ainsi, M2 et M2_{destr} reposent sur une stratégie visant à relaxer le facteur d'épaississement vers sa valeur nominale \mathcal{F}_{target} , sur des durées comparables à un temps de flamme épaissie \mathcal{T}_{flamme} . Un fonctionnement bimodal AI/déflagration est également introduit de façon à adapter la réponse du modèle au régime de combustion. En pratique, et pour les cas A15 à B60, les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} reproduisent à la fois les délais d'AI des cas référence, et les propriétés du modèle TFM-M0 pour la propagation d'une flamme épaissie. Les temps de relaxation vers \mathcal{F}_{target} permettent l'établissement d'un profil de flamme épaissie à partir d'un front d'AI, tout en limitant l'interaction entre l'AI et le facteur d'épaississement, ainsi que le bilan diffusion/réaction durant la transition AI→déflagration. L'hypothèse n°2 semble alors vérifiée en pratique. De plus, la transition d'un mode de fonctionnement à l'autre (AI/déflagration) s'étend sur des durées comparables à celles des transitions AI→déflagration τ_{trans}^{ref} observées dans les calculs de référence. La modélisation semble donc compatible avec les analyses physiques réalisées au chapitre 4 (section 4.2.6.5).

Toutefois, une étude de sensibilité au paramètre de relaxation $\mathcal{R}_{flametime}$ souligne des problèmes de non-transition vers le mode déflagration pour TFM-M2 - $\mathcal{R}_{flametime} = 0.40$. Cela se traduit par une propagation du front sous-résolue, et une mauvaise estimation du dégagement de chaleur. Le modèle TFM-M2_{destr} atténue significativement ces problèmes de non-transition, sans toutefois les éliminer totalement (cas B60 - $\mathcal{R}_{flametime} = 0.30 - 0.40$). Cela montre un apport de robustesse de TFM-M2_{destr} (bien que perfectible) par rapport à TFM-M2. Toutefois, les problèmes de non-transition du cas B60 sont attribués à la présence d'ondes de pression de relativement forte amplitude (environ 6bar), en pratique peu susceptibles d'être rencontrées en conditions moteur usuelles (hors cliquetis/détonation).

De même, l'application du facteur d'épaississement en conditions stratifiées intensifie les phénomènes diffusifs (notamment le mélange riche/pauvre), et génère une surestimation du dégagement de chaleur du front de flamme épaissie. Cet effet est particulièrement présent dans les cas plus fortement stratifiés (A15 et A60, $L_{spot} = 1.0\text{mm}$) comme remarqué pour les calculs TFM-M0 et TFM-M1 discutés précédemment. Cela encourage alors le développement d'une modélisation capable de prendre en compte les effets relatifs à une intensification des phénomènes diffusifs en conditions stratifiées. Cela n'a pas été effectué ici, le but étant de traiter la transition AI→déflagration uniquement.

En résumé, les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} reproduisent les comportements limites recherchés (AI et déflagration), contrairement aux approches TFM-M0, TFM-M1, et no-model étudiées précédemment, ce qui encourage a priori leur utilisation en conditions moteurs LES 3D. Toutefois, des problèmes de non-transition peuvent survenir avec TFM-M2, pour des valeurs $\mathcal{R}_{flametime}$ élevées, et dans une moindre mesure avec M2_{destr}. Ainsi, l'utilisation du modèle TFM-M2_{destr} et de paramètres de relaxation de l'ordre de $\mathcal{R}_{flametime} = 0.2-0.3$ sont préconisés, cette configuration exhibant une robustesse supérieure. Le modèle TFM-M2_{destr} est donc considéré comme modèle "final" de ce travail.

5.5.7 Conclusions de l’approche à modèle de flamme épaissie

Les calculs no-model permettent de reproduire les délais d’AI en conditions plus ou moins stratifiées, dès lors que la zone de mélange Dual-Fuel est suffisamment résolue (i.e. à minima 10 points entre Z_{min} et Z_{max}). Cependant, un maillage LES ne permet pas la résolution d’un front de flamme en conditions moteur, d’où le besoin d’une modélisation. Une orientation vers une approche TFM est alors choisie.

Ainsi, le modèle TFM-M0 (Jaravel [48]) permet la résolution d’un front de flamme sur un maillage LES. Toutefois, il entraîne un allongement significatif des délais d’AI et ne peut donc pas être utilisé en configuration 3D LES moteur. Afin de limiter cet effet d’allongement, le modèle TFM-M1 est développé.

Le modèle TFM-M1, comprenant un critère d’avancement c_{seuil} visant à limiter l’influence du facteur d’épaississement sur l’AI, est proposé. Il reprend les caractéristique de TFM-M0, et permet d’atténuer l’augmentation des délais d’AI par rapport à TFM-M0, voire dans certains cas à reproduire le comportement de référence en AI (cas B15, et dans une moindre mesure, B60). Cependant, le facteur d’épaississement inhibe fortement l’AI dans des cas plus fortement stratifiés (cas A15, et A60). Pour déterminer pourquoi TFM-M1 reproduit le comportement de référence pour les cas B15 et B60, et non pour A15 et A60 une analyse du bilan réaction/diffusion à l’allumage est conduite (section 5.5.4.2). L’utilisation de TFM-M1 en configuration LES moteur paraît donc prohibée, au même titre que celle de TFM-M0. Cela suggère alors le besoin d’une modélisation plus fine de la transition AI→déflagration, menant aux modèles M2 et M2_{destr}.

Les modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr} parviennent à reproduire le comportement de TFM-M0 en mode déflagration (les propriétés éprouvées du modèle initial [48] sont conservées), tout en reproduisant les délais d’AI de référence. Toutefois (et tout comme pour TFM-M1), l’intensification des effets diffusifs imputables au facteur d’épaississement génère des effets de mélange dans la zone stratifiée Dual-Fuel, et entraîne une surestimation du dégagement de chaleur global. L’influence du paramètre de relaxation $\mathcal{R}_{flametime}$ est étudiée et montre une influence modérée sur les résultats pour M2_{destr}. Cependant, l’augmentation du paramètre $\mathcal{R}_{flametime}$ induit dans certains cas ($\mathcal{R}_{flametime} = 0.30 - 0.40$, cas B60) des problèmes de non-transition vers le mode déflagration (et donc une propagation sous-réolue). Ces non-transitions sont particulièrement notables pour M2, et dans une moindre mesure pour M2_{destr}, ce qui montre un apport de robustesse de M2_{destr} par rapport à M2.

En résumé, M2 et M2_{destr} peuvent a priori être utilisés en conditions moteur puisqu’ils reproduisent les comportements limites recherchés (AI/déflagration), toutefois, M2_{destr} est plus robuste et est donc préconisé. Un tableau résumant l’ensemble des tendances observées au cours de ce chapitre est proposé Tab.5.4

5.6 Conclusions du chapitre

Deux approches de modélisation de la transition AI déflagration ont été développées et testées dans ce chapitre :

La première, TKI-ECFM, est basée sur une tabulation 0D des taux de réaction d'AI et sur le transport d'une densité de surface de flamme, et se montre capable de représenter des phénomènes de transition AI→déflagration au moyen du critère d'avancement d'AI $\tilde{c}_{AI}^{seuil} = 0.50$. Toutefois, les conditions fortement stratifiées mettant en jeu une interaction diffusion/réaction significative durant l'AI (effets de dissipation scalaire) ne sont pas correctement représentées par TKI. En effet, l'apparition de l'AI (TKI) ainsi que la transition vers un régime de déflagration (ECFM) interviennent avec une avance significative par rapport au calcul de référence (cas A15). Cela prohibe l'utilisation de l'approche TKI-ECFM dans des conditions impliquant de fortes stratifications, même si celles-ci sont suffisamment résolues (i.e. a minima 10 points entre Z_{min} et Z_{max}). Cela suggère le alors développement d'une approche de modélisation différente.

La deuxième, est basée sur une approche de type flamme épaissie (TFM). Celle-ci implique une résolution directe de la chimie, mais repose sur une hypothèse de chimie homogène tout comme TKI (i.e. aucune modélisation des stratifications non-résolues).

- Dans un premier temps, le modèle "standard" TFM-M0 tel que formulé par Jaravel [48] est testé et génère de forts retards à l'AI. En effet, dans TFM-M0 l'application du facteur d'épaississement est uniquement conditionnée par les taux de réaction locaux, lesquels peuvent être comparables en régimes d'AI et de déflagration. TFM-M0 est alors incapable de discriminer un noyau d'AI d'un front de flamme, et entraîne de forts retard à l'AI en raison d'un ralentissement d'un facteur \mathcal{F}_{target} de la cinétique réactionnelle.
- Dans un second temps, un critère d'avancement c_{seuil} est introduit de façon à retarder l'application du facteur d'épaississement, et donc limiter les retards à l'AI. C'est le modèle TFM-M1. Cette approche se révèle relativement efficace pour des stratifications faibles (cas B15 et B60), mais ne parvient pas à éliminer le retard à l'AI pour des stratification plus raides (cas A15 et A60).
- Dans un troisième temps, un temps de relaxation est adjoint au critère d'avancement c_{seuil} de façon à retarder davantage l'application du facteur d'épaississement, et donc permettre une description correcte de l'AI. Il s'agit des modèles TFM-M2 et TFM-M2_{destr}, très proches entre eux. Ce temps de relaxation est notamment basé sur les temps physiques de transition AI→déflagration τ_{trans} observés dans l'étude fondamentale 1D (chapitre 3), ainsi que sur le temps d'établissement d'un front de flamme épaissie à partir d'un front d'AI. L'introduction d'un temps de relaxation permet alors de maintenir des facteurs d'épaississement proches de 1.0 durant l'AI, et d'augmenter progressivement vers la valeur nominale \mathcal{F}_{target} permettant la résolution de la propagation de flamme subséquente. En pratique, TFM-M2 et TFM-M2_{destr} permettent de reproduire conjointement les délais d'AI de référence, et les propriétés d'une propagation de flamme pré-mélangée dans des conditions typiques moteur.

Le modèle TFM-M2_{destr} présentant une meilleure robustesse, il est considéré comme modèle "final" de ce travail de modélisation, et est testé en configuration LES 3D Dual-Fuel au chapitre suivant.

Modèle	Description	Objectif	Résultats	Analyse
TKI-EGFM	Couplage TKI-EGFM basé sur un découplage des variables d'avancement (\tilde{c}_{AI} et \tilde{c}_2), et dépôt de Σ basé sur \tilde{c}_{AI} .	Comparer à la référence sur les parties AI et déflagration.	Bonne/Mauvaise description de l'AI en conditions faiblement/fortement stratifiées. Bonne description de la déflagration.	Non-prise en compte d'effets de dissipation scalaire sur l'AI.
<i>no-model</i>	Aucun modèle.	Comparer à la référence sur la partie AI.	Bonne description de l'AI. Mauvaise description de la déflagration.	Aucun épaississement, front de flamme sous-résolu.
M0	Modèle de Jaravel standard [48].	Étudier la validité en AI. Vérifier la validité en déflagration.	Mauvaise description de l'AI (forte augmentation des délais). Bonne description de la déflagration.	Épaississement permettant la résolution du front de flamme, mais inadapté à l'AI.
M1	Critères sur c agissant sur le senseur de réaction S_{NF} .	Étudier les critères sur c permettant de retarder l'épaississement.	Mauvaise description de l'AI (souvent améliorée comparé à M0). Bonne description de la déflagration.	Conditionnement de S_{NF} insuffisant pour éliminer le retard à l'AI.
M2	Critères sur c agissant sur l'indicateur de flamme ψ . Fonctionnement bimodal AI/déflagration et temps de relaxation vers F_{target} .	Développer une approche visant à relaxer l'épaississement durant la transition AI→déflagration.	Bonne description de l'AI et de la déflagration. Manque de robustesse de la transition vers le mode déflagration.	Conditionnement de ψ capable d'éliminer le retard à l'AI. Propriétés de M0 conservées en mode déflagration.
M2 _{destr}	Idem M2 + conditionnement des termes de destruction de ψ .	Idem M2 + améliorer la robustesse de la transition vers le mode déflagration.	Idem M2, mais avec une transition vers le mode déflagration plus robuste.	Conditionnement des termes destruction de ψ capable de limiter les problèmes de non-transition.

TABLE 5.4 – Tableau récapitulatif résumant le comportement de l'ensemble des approches/modèles testés dans ce chapitre.

Troisième partie

Transition AI→déflagration : Évaluation des modèles
en configurations *Dual-Fuel* académiques et
industrielles

Application des modèles en configuration *Dual-Fuel* académique

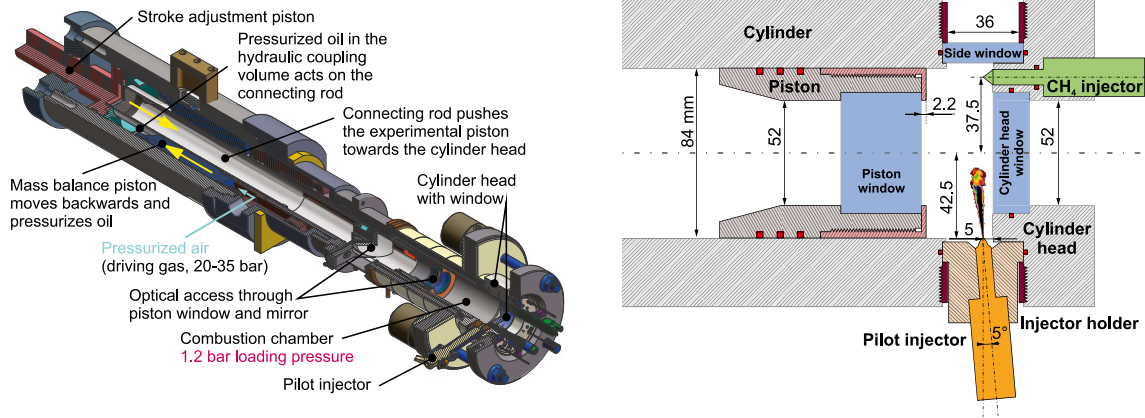
Ce chapitre est dédié à l'application des modèles présentés au chapitre 5, sur une configuration représentative d'un banc d'essais académique présent à l'ETH Zurich, et utilisée lors des travaux de Srna [115]. Premièrement, le banc d'essais ainsi que la configuration numérique représentative sont présentés. Deuxièmement, une comparaison expérimental/numérique en conditions à froid est réalisée, et la formation de la zone de mélange et les aspects aérodynamiques sont discutés. Troisièmement, les différents modèles de combustion sont comparés entre eux. La confrontation des calculs no-model, TFM-M0, et TFM-M2_{destr} permet de discuter la modélisation du facteur d'épaississement, et particulièrement de sa capacité à traiter la transition AI→déflagration. Le couplage TKI-ECFM et la pertinence du critère dépôt de surface de flamme utilisé pour traiter la transition AI→déflagration sont également discutés. Les résultats des calculs TFM-M2_{destr} et TKI-ECFM sont ensuite comparés en termes de délais d'AI, de dégagement d'énergie, et de comportement global. Les résultats numériques sont finalement comparés aux résultats expérimentaux de Srna [115], point de référence pour l'évaluation des modèles.

6.1 Présentation du banc d'essais

Le banc d'essais est une machine à compression-expansion rapide (MCER) fonctionnant selon un mode monocycle (compression-expansion), et pouvant atteindre des pressions supérieures à 60bar. Les phases de compression et détente sont assurées par un système hydraulique couplé à un ensemble piston-balourd décrivant des mouvements opposés, de façon à équilibrer dynamiquement le système. Ainsi, la trajectoire du piston est conditionnée par un différentiel de pression entre le système hydraulique et la chambre, et ne répond pas à un système bielle-manivelle "classique". La course du piston est directement liée à la pression en chambre et diffère donc d'un point d'opération à l'autre. Toutefois, sur une plage de 4.0ms autour du PMH, une forte proximité avec la course d'un moteur tournant à 1200 tr/min est rapportée pour tous les points d'opérations expérimentaux.

Cette MCER possède un piston muni d'un bol permettant un accès optique à la chambre de combustion. La culasse dispose également de deux accès optiques, mais seule la fenêtre du piston est exploitée dans les travaux de Srna [115]. Un injecteur Diesel Bosch CRI2 16 est utilisé pour le spray pilote et disposé sur la paroi du cylindre, à 5mm de la culasse, selon un angle de 5° avec celle-ci (i.e. 5° par rapport à l'horizontale). L'injecteur comporte un trou unique de 100μm de diamètre, et de coefficient de perte de charge $C_d = 0.80$. Le mélange air/méthane est issu de l'injection de méthane pur dans la chambre remplie d'air, au PMB, et environ 4.0s avant la phase de compression. Ce temps de mélange long de 4.0s permet l'homogénéisation du mélange air/méthane. Les écarts types en composition et température reportés sont respectivement $\sigma_{comp} = 0.067$ et $\sigma_{Temp} = 3K$. Les vitesses

rencontrées dans la chambre étant faibles, le mélange est considéré stagnant lors de l'injection.



(a) Vue d'ensemble du banc d'essais expérimental. La course du piston est conditionnée par un système hydraulique placé en aval de celui-ci. Différents accès optiques permettent la visualisation des phénomènes se déroulant dans la chambre.

(b) Schéma de la chambre de combustion expérimentale et de ses différents composants. Plusieurs singularités géométriques forment des volumes morts (*Side window, Piston window, Injector holder*). Les deux carburants sont introduits à travers un injecteur gazeux (CH_4) et un injecteur liquide (*n*-dodécane).

FIGURE 6.1 – Représentation de la machine à compression rapide (MCER) utilisée dans les travaux de Srna [115].

6.2 Méthodes de métrologie

6.2.1 Taux de dégagement de chaleur

Le taux de dégagement de chaleur est estimé à partir du signal de pression, des pertes thermiques aux parois, et des pertes de masse liées à la perméabilité du système. Le signal de pression est acquis via un capteur piézoélectrique (Kistler 7061B) opérant à une fréquence de 100Hz, tandis que les flux pariétaux sont exprimés à partir d'une loi de Woschni adaptée aux conditions particulières du banc (mélange stagnant au moment de l'injection pilote), et les flux massiques sont modélisés à partir d'une loi de labyrinthe [109] et des spécifications techniques du banc, non-détaillées ici. Ce calcul de dégagement de chaleur prenant en compte un ensemble de composantes n'est toutefois pas présenté ici. Seul un calcul du dégagement de chaleur "effectif", représentant la quantité effectivement transformée en travail mécanique par le cylindre, (dérivée du premier principe de la thermodynamique) est alors présenté. Cette quantité, ne prenant pas en compte les flux thermiques et massiques, simplifie la comparaison entre les données expérimentales et numériques, et s'exprime comme Eq. (6.1) :

$$HRR_{eff} = \left(\frac{\gamma}{\gamma - 1} \right) P \frac{dV}{dt} + \left(\frac{1}{\gamma - 1} \right) V \frac{dP}{dt} \quad (6.1)$$

6.2.2 Richesse (TMPD-PLIF)

La technique PLIF (Planar Light-Induced Fluorescence) est utilisée pour estimer localement la richesse dans le jet. Le carburant pilote est enrichi en TMPD à hauteur de 1.5g/l, espèce utilisée comme traceur. Ses propriétés thermo-physiques proches de celles du n-dodécane, ainsi que sa capacité de fluorescence lorsqu'exposé à un signal lumineux de longueur d'onde de 355nm, permettent de déduire une concentration locale en n-dodécane. La résolution du signal TMPD-PLIF est de 110 μ m/pixel, et le temps d'exposition de la caméra de 100ns. Cependant, le signal PLIF n'est exploitable que lorsque la concentration en TMPD est suffisamment élevée. Afin d'éviter l'évanescence du signal PLIF par oxydation du traceur TMPD, la chambre est remplie d'azote pur et les essais sont réalisés en conditions non-réactives. De même, la dispersion du jet entraînant une forte dilution du traceur TMPD dans la chambre, le signal n'est considéré exploitable que jusqu'aux alentours de 2.0ms après le début de l'injection. De plus, le plan de visualisation PLIF n'est pas aligné avec le plan d'injection (décrivant pour rappel un angle de 5° avec la culasse), mais établi selon une inclinaison de 3.5°. La valeur de 3.5° est rapportée par Srna [115] comme adaptée à la trajectoire de dispersion du jet. Ce désaxage s'explique par une interaction

aérodynamique entre le jet et le mouvement ascendant du piston.

Bien que les essais TMPD-PLIF soient effectués à froid, les résultats sont considérés représentatifs des cas réactifs jusqu'à l'AI de flamme froide (LTC).

6.2.3 Chimie de flamme froide (CH_2O -PLIF)

La technique PLIF est utilisée pour détecter l'intermédiaire réactionnel CH_2O , considéré comme un traceur de flamme froide. Contrairement au signal TMPD-PLIF, le signal CH_2O -PLIF ne fournit qu'un critère indicatif sur la présence de CH_2O , et ne permet pas d'évaluer une concentration locale. Le même axe optique (i.e. 3.5° d'inclinaison) est utilisé pour la visualisation CH_2O -PLIF, la résolution du signal est de $110\mu\text{m}/\text{pixel}$ et le temps d'exposition de 100ns, également.

6.2.4 Chimie de flamme chaude (chimiluminescence OH^*)

La technique de chimiluminescence est utilisée pour détecter le radical OH^* . Ce dernier est considéré comme un traceur de chimie de flamme chaude (HTC), et donc associé à l'AI de flamme chaude (HTC) ou la propagation d'un front de flamme. Contrairement aux signaux PLIF représentatifs d'un plan de coupe, le signal de chimiluminescence OH^* est volumique et représentatif de l'ensemble du jet. L'imagerie OH^* représente alors l'intégrale du signal lumineux OH^* selon une ligne perpendiculaire à l'axe de visualisation. Identiquement au traitement CH_2O -PLIF, le signal OH^* permet une représentation qualitative de la présence en OH^* , et ne permet pas de d'estimer une concentration locale.

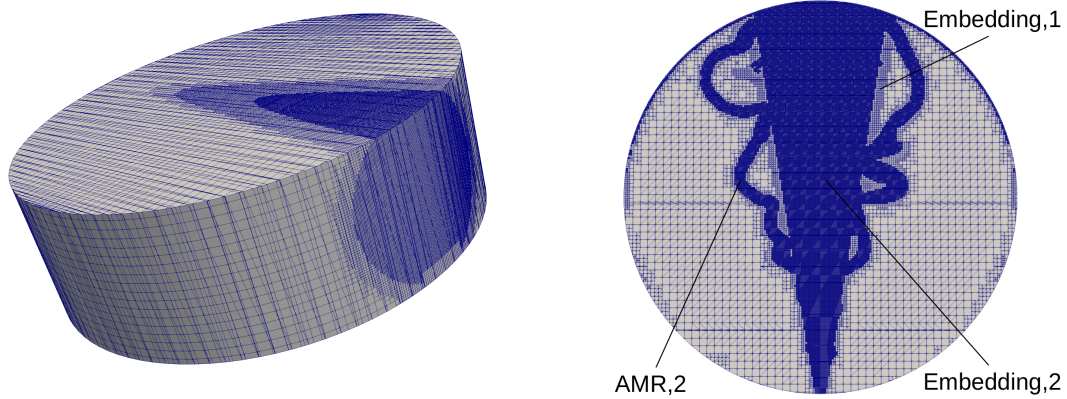
6.3 Configuration numérique

6.3.1 Maillage

Les chambres de combustion expérimentale et numérique possèdent des géométries différentes. La chambre expérimentale est globalement cylindrique de rayon $D_{cyl} = 84\text{mm}$, mais possède différents volumes morts (hublots, injecteurs) qui n'ont pas été reproduits sur le domaine numérique. Le volume de calcul numérique est alors assimilé à un cylindre parfait de rayon $D_{cyl} = 84\text{mm}$, par souci de simplicité, et les volumes morts sont pris en compte dans la course du piston.

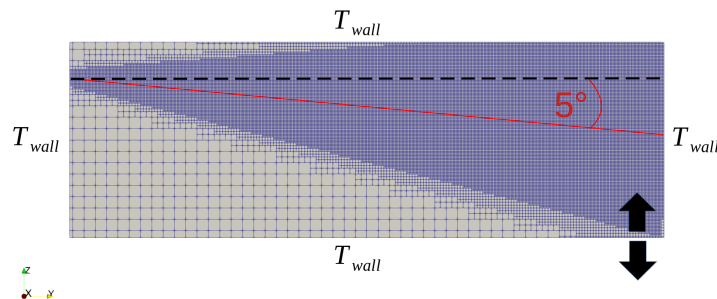
Un maillage cartésien comportant trois degrés de raffinement est utilisé. Les variations volumétriques représentatives de la course du piston s'effectuent via des mouvements ascendants/descendants de la paroi inférieure du domaine. Le premier niveau de raffinement correspondant au maillage de base est tel que $\Delta_x^{base} = 800\mu\text{m}$, les second et troisième (embedding de degré 1 et 2) sont tels que $\Delta_x^{emb,1} = 400\mu\text{m}$ et $\Delta_x^{emb,2} = 200\mu\text{m}$, respectivement. Ces zones raffinées sont alignées avec l'axe de l'injecteur (i.e. 5° d'inclinaison) de façon à englober le contour du jet et à en améliorer la résolution. Un maillage adaptatif (AMR) est imposé sur la vitesse (critère de fluctuation de sous-maille u') et sur le front de flamme (critère de réactivité en dégagement de chaleur ou densité de surface de flamme), de façon à traquer le contour du jet après l'allumage. Les tailles de mailles sont telles que $\Delta_x^{AMR,1} = 400\mu\text{m}$ et $\Delta_x^{AMR,2} = 200\mu\text{m}$. Une brève étude de sensibilité au maillage est également réalisée. Les trois tailles de mailles impliquées sont telles que $\Delta_x^{base} = 600\mu\text{m}$, $\Delta_x^{emb,1} = \Delta_x^{AMR,1} = 300\mu\text{m}$, et $\Delta_x^{emb,2} = \Delta_x^{AMR,2} = 150\mu\text{m}$.

Pour les cas réactifs, le domaine comporte entre 3 et 7 millions de cellules avec $\Delta_x^{base} = 800\mu\text{m}$, et 6 à 12 millions avec $\Delta_x^{base} = 600\mu\text{m}$, selon la volumétrie à l'instant simulé.



(a) Vue d'ensemble du maillage. Trois niveaux de raffinement suivant sont visibles.

(b) Coupe transversale du domaine. Axe d'injection du carburant pilote (*embedding*), et zones de réaction (*AMR*) davantage raffinées.



(c) Coupe longitudinale du domaine. Axe du jet et régions raffinées (*embedding*) inclinées de 5° par rapport au plan horizontal. Températures aux parois T_{wall} constantes. Paroi inférieure reproduisant la course expérimentale.

FIGURE 6.2 – Description du domaine, des conditions aux limites, et du maillage utilisé.

6.3.2 Conditions initiales

Le banc expérimental comprend une phase de compression, ainsi qu'une phase de détente. Toutefois, la phase de combustion démarrant après l'injection du carburant pilote, ne représente qu'une partie de l'ensemble du cycle. Une partie des phases de compression et de détente intervenant en amont de l'injection, et loin en aval de l'allumage sont donc exclues. Les calculs visant à étudier la transition AI→déflagration, démarrent au début de l'injection, par souci de simplicité.

Les conditions expérimentales de début d'injection définissent ainsi les conditions initiales des calculs numériques. Ainsi, la pression et température de début d'injection P_{SOI} et T_{SOI} (Pressure/Temperature at Start Of Injection), la richesse du pré-mélange ϕ_{CH_4} présent dans la chambre avant l'injection pilote, ainsi qu'un champ de vitesse nulle, constituent ces conditions initiales.

6.3.3 Conditions d'opération

Les travaux menés durant la thèse de A.Srna [115] permettent d'étudier l'influence du méthane sur les délais d'AI, et sur les différents régimes de combustion rencontrés, moyennant le balayage d'une vaste étendue de conditions thermodynamiques. Toutefois, dans le cadre d'un travail de modélisation numérique, de telles variations paramétriques auraient un coût de calcul prohibitif. Ainsi, un point de fonctionnement réactif et non-réactif récapitulés en tableau Tab.6.3a et 6.3b sont sélectionnés.

Une température $T_{SOI} = 850K$ élevée est sélectionnée de façon à obtenir un allumage plus précoce, et ainsi avancer temporellement la transition AI→déflagration, et écourter les calculs. À noter toutefois que des mesures

à $T_{SOI} = 1000K$ ont été réalisées, écourtant potentiellement davantage les délais d'allumage. Cependant, ces mesures ont été uniquement réalisées à $P_{SOI} = 45\text{bar}$, augmentant alors considérablement les valeurs d'épaissement mises en jeu par le modèle TFM. Le but de l'étude étant de maintenir des valeurs maximales de l'ordre de $\mathcal{F}_{target} \approx 100$ similaires à celles rencontrées au chapitre 4, et pour lesquelles le modèle TFM-M2_{destr} est discuté, une pression modérée $P_{SOI} = 25\text{bar}$ est choisie.

Une masse de carburant pilote $m_{C_{12}H_{26}}$ et une richesse de pré-mélange ϕ_{CH_4} intermédiaires (i.e. centrées entre les valeurs min et max étudiées expérimentalement) ont quant à elles été choisies de façon relativement arbitraire. L'interaction entre un spray lagrangien et un front de réaction fait l'objet de recherches en termes de modélisation. Ainsi, une stratégie visant à éviter une interaction spray/flamme et les difficultés qu'elle pose est adoptée : une durée d'injection $\tau_{inj,C_{12}H_{26}}$ courte est alors choisie de façon à favoriser l'évaporation totale du spray pilote avant l'allumage.

Aussi, un cas non-réactif reprenant les caractéristiques du cas réactif est réalisé. Le pré-mélange air/ CH_4 est alors remplacé par du N_2 pur.

T_{SOI}	850 K
P_{SOI}	25 bar
$\tau_{inj,C_{12}H_{26}}$	0.45 ms
$m_{inj,C_{12}H_{26}}$	1.21 mg
Y_{CH_4}	0.0
Y_{O_2}	0.0
Y_{N_2}	1.0
ϕ_{CH_4}	0.0

(a) Cas non-réactif.

T_{SOI}	850 K
P_{SOI}	25 bar
$\tau_{inj,C_{12}H_{26}}$	0.45 ms
$m_{inj,C_{12}H_{26}}$	1.21 mg
Y_{CH_4}	0.0327
Y_{O_2}	0.2253
Y_{N_2}	0.7420
ϕ_{CH_4}	0.58

(b) Cas réactif.

FIGURE 6.3 – Récapitulatif des conditions initiales du cas réactif et non-réactif.

6.3.4 Conditions aux limites

6.3.4.1 Flux pariétaux

Expérimentalement, une unique mesure de température pariétale est réalisée au point mort bas du système, valant pour les cas réactifs et non-réactifs traités ici, $T_{PMB} = 363K$. L'évolution de la température pariétale au cours de l'expérience est donc inconnue. Néanmoins, les échelles de temps de l'étude étant très courtes (environ 20ms entre la compression et l'allumage), la température aux parois est considérée constante. Par conséquent, une température pariétale constante $T_{wall} = T_{PMB} = 363K$ est maintenue durant le calcul numérique. Des conditions de non-glissement sont imposées à l'ensemble des frontières du domaine, et les échanges thermiques sont estimés par une loi de paroi.

Le modèle de Amsden [4] est utilisé pour les flux pariétaux s'écrivant comme :

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} = \frac{\mu c_p F (T_f - T_{wall})}{Pr y} \quad (6.2)$$

$$F = \begin{cases} 1.0 & \text{si } y^+ < 11.05 \\ \frac{\left(\frac{y^+ Pr}{Pr_t}\right)}{\frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + B + 11.05 \left(\frac{Pr}{Pr_t} - 1\right)} & \text{si } y^+ > 11.05 \end{cases} \quad (6.3)$$

$$y^+ = \frac{\rho u_t y}{\mu} \quad (6.4) \quad u_t = \sqrt{\frac{\mu \frac{\partial u}{\partial y} \big|_{y=0}}{\rho}} \quad (6.5)$$

avec k la conductivité moléculaire, κ la constante de Von Karmann égale à 0.4187, B une constante turbulente, Pr le nombre de Prandtl, T_f la température du fluide, u_t la vitesse de cisaillement tangente à la paroi. Il est

souligné que les calculs TFM font l'objet d'une adaptation particulière : Afin de limiter la surestimation des flux pariétaux, une correction du facteur d'épaissement aux frontières du domaine est appliquée, et s'exprime comme Eq.(6.6) :

$$corr_{wall} = \frac{1}{2} \left(1.0 + \tanh \left(\frac{dist - 1.0}{0.15} \right) \right) \quad (6.6)$$

avec le paramètre $dist$ représentant une distance à la paroi adimensionnée par l'épaisseur de flamme épaissie. La relation $corr_{wall}$ tend vers zéro à proximité de la paroi. Le senseur de flamme \hat{S} , est multiplié par $corr_{wall}$ et tend vers 0 en proche de la paroi. Le facteur d'épaissement tend alors vers 1.0, ce qui limite les éventuels effets de sur-diffusivité entraînant une surestimation des flux pariétaux.

6.3.4.2 Volumétrie

Expérimentalement, le piston est piloté par un différentiel de pression entre la chambre et un système hydraulique, ce qui implique une course spécifique (i.e. différente d'un système bielle-manivelle). La paroi inférieure du domaine numérique est mouvante Fig.6.2c, représente le haut du piston, et est conditionnée par la course expérimentale. La course numérique est toutefois adaptée pour prendre en compte les différents volumes morts du banc d'essais et faire concorder les volumes totaux expérimentaux et numériques.

6.3.5 Loi d'état

Les niveaux de pression/température élevés rencontrés dans cette configuration suggèrent l'utilisation d'une loi d'état capable de tenir compte de l'interaction entre les différentes particules. La loi de Redlich-Kwong [91] est donc utilisée ici pour relier la température et la pression.

$$p = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2 + ubv + wb^2} \quad (6.7)$$

avec $u = 1$, $w = 0$, $b = \beta v_c$, $a = \alpha_{rk} \frac{p_c v_c^2}{\sqrt{T_p}}$, et constantes $\alpha_{RK} = 0.42748$ et $\beta_{RK} = 0.08664$. Les grandeurs T_c , P_c , et v_c représentent respectivement la température, la pression, et le volume au point critique tel que Eq.(6.8) :

$$v_c = \frac{RT_c}{p_c} \quad (6.8)$$

6.3.6 Phase liquide

6.3.6.1 Paramètres d'injection

L'injecteur expérimental comporte un trou unique dispersant un spray n-dodécane selon un angle d'ouverture de 17° . Aucune mesure de taille de goutte n'ayant été opérée expérimentalement, une injection lagrangienne mono-disperse est utilisée. Les gouttes injectées ont un diamètre $d_{drop}^{inj} = 100\mu\text{m}$ égal au diamètre de la buse.

Le débit massique expérimental en carburant pilote (moyenné sur plusieurs cycles) est appliqué dans les calculs numériques Fig.6.4. Cependant, le point d'opération considéré fait intervenir une injection très courte, favorable à de fortes variabilités d'un cycle à l'autre. L'évolution temporelle du débit d'injection moyennée sur plusieurs cycles, n'est donc pas nécessairement représentative de celle d'un cycle isolé. Or, les comparaisons expérimental/numérique discutées en section 6.6 étant opérées sur un cycle unique, le débit massique imposé au calcul numérique peut fortement différer du débit expérimental pour le cycle unique considéré. Une forte incertitude sur l'évolution temporelle du débit d'injection existe alors.

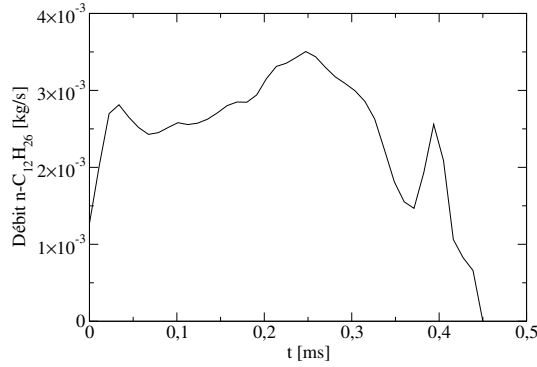


FIGURE 6.4 – Évolution temporelle du débit massique d'injection de carburant pilote.

6.3.6.2 Traînée aérodynamique

La traînée aérodynamique repose sur le modèle de O'Rourke [81]. La vitesse v des particules est gouvernée par une équation dynamique s'exprimant comme Eq.(6.9) :

$$\rho_l V_p \frac{dv}{dt} = F_{drag} + F_{vol} = \underbrace{\frac{1}{2} C_D A_p \rho_g \mathcal{U}_p^2}_{\text{traînée}} + \underbrace{\rho_l V_p g}_{\text{volumique}} \quad (6.9)$$

avec ρ_l la masse volumique liquide, g la gravité, V_p , C_D , A_p , et \mathcal{U}_p le volume, le coefficient de traînée aérodynamique, la surface frontale, et la vitesse de la particule dans le référentiel de l'écoulement, respectivement. La non-sphéricité des particules déformables est prise en compte par un paramètre de distorsion \mathcal{Y}_{distor} . Les particules sont soumises à un ensemble de forces participant au déplacement de leur surface libre (déformation). Ce déplacement est noté x et représente la déformation de la surface libre par rapport à une sphère non-distordue de masse équivalente et de rayon r_0 . La seconde loi de Newton décrivant ces distorsions est de la forme Eq.(6.10) :

$$F - kx - d\dot{x} = m\ddot{x} \quad (6.10)$$

En effectuant le changement de variable $y = x/(C_b r_0)$ et en explicitant les différents termes, l'équation Eq.(6.10) peut être reformulée comme Eq.(6.11) :

$$\ddot{y} = \underbrace{\frac{C_F \rho_g \mathcal{U}^2}{C_b \rho_l r_0^2}}_{\text{tension de surface}} - \underbrace{\frac{C_k \sigma}{\rho_l r_0^3} y}_{\text{efforts visqueux}} - \underbrace{\frac{C_d \mu_l}{\rho_l r_0^2} \frac{dy}{dt}}_{\text{traînée aérodynamique}} \quad (6.11)$$

avec ρ_l , ρ_g , les masses volumiques du liquide et du gaz ambiant, \mathcal{U} la vitesse relative de la particule par rapport à l'écoulement, r_0 , σ , et μ_l le rayon, la tension de surface, et la viscosité cinématique de la particule. Les paramètres C_F , C_k , C_b et C_d sont des paramètres sans dimension. La déformation de la particule permet le calcul du paramètre de distorsion \mathcal{Y}_{distor} , lequel permet le calcul du coefficient de traînée Eq.(6.12) de la particule et donc de sa trajectoire.

$$C_D = C_{D,sphere}(1 + 2.632y) \quad (6.12)$$

6.3.6.3 Atomisation du jet

L'atomisation primaire et secondaire du jet s'appuie sur les modèles de Kelvin-Helmoltz, et Rayleigh-Taylor, respectivement. Le modèle de Kelvin-Helmoltz est basé sur l'analyse de stabilité d'un cylindre liquide de rayon R , expulsé d'un orifice à vitesse v dans un jet stagnant, et incompressible. Ce dernier suppose qu'une particule mère de rayon r_m se divise en particules filles de rayon r_f s'exprimant comme Eq.(6.13) :

$$r_f = B_0 \lambda_{KH} \quad (6.13)$$

La déstabilisation du jet liquide fait intervenir un mode principal, dont l'amplitude croît plus rapidement. Ce mode, présentant un taux de croissance maximal, est associé à une longueur d'onde λ_{KH} , et une fréquence Ω_{KH} .

Ces deux grandeurs sont calculées à partir d'un jeu d'équation hydrodynamiques décrites par Reitz et al. [92], non reprises ici.

Lorsque les gouttes filles ont atteint une masse suffisante, des particules lagrangiennes sont créées et soumises à leur tour à un jeu d'équations hydrodynamiques. En raison de la perte de masse due à l'atomisation, le diamètre de la particule mère diminue comme Eq.(6.14) :

$$\frac{dr_m}{dt} = \frac{r_m - r_f}{\tau_{KH}} \quad (6.14)$$

avec τ_{KH} le temps d'atomisation caractéristique. Les gouttes filles adoptent la vitesse de la goutte mère, à laquelle s'ajoute une vitesse v_n de direction normale à celle-ci telle que :

$$v_n = C_1 \lambda_{KH} \Omega_{KH} \quad (6.15)$$

L'atomisation secondaire est assurée par le modèle de Rayleigh-Taylor. Ce dernier suppose que les instabilités hydrodynamiques s'appliquant à une goutte mère, dues à sa rapide décélération dans le milieu gazeux ambiant, provoquent sa fragmentation en gouttes filles. Tout comme pour l'instabilité de Kelvin-Helmoltz à l'origine de l'atomisation primaire, l'instabilité de Rayleigh-Taylor implique un mode de déstabilisation dominant, de longueur d'onde λ_{RT} et un nombre d'onde K_{RT} , qui est fonction des efforts aérodynamiques. La fragmentation de la goutte mère en gouttes filles s'appuie sur la comparaison entre λ_{RT} et le diamètre de la goutte. Lorsque $\lambda_{RT} > r_m$, la fragmentation est permise et s'effectue après un temps caractéristique τ_{RT} , créant de nouvelles particules lagrangiennes de diamètre r_f tel que :

$$r_f = \frac{\pi C_{RT}}{\tau_{RT}} \quad (6.16)$$

6.3.6.4 Évaporation du jet

La température des particules est supposée uniforme, et l'évaporation des particules est traitée par la corrélation de Frossling [5]. Concernant l'évaporation, les particules sont considérées sphériques et de température uniforme. Le flux massique par évaporation entraîne une évolution temporelle du rayon de la particule, s'écrivant comme Eq.(6.17) :

$$\frac{dr_0}{dt} = -\frac{\alpha_{spray} \rho_g \mathcal{D}_g}{2\rho_l r_0} B_d Sh_p \quad (6.17)$$

avec α_{spray} un paramètre adimensionnel, \mathcal{D}_g la diffusivité moléculaire du gaz ambiant, et Sh_p le nombre de Sherwood de la particule Eq.(6.18), faisant intervenir la variable B_d Eq.(6.19) :

$$Sh_d = \left(2.0 + 0.6 Re_p Sc^{1/3}\right) \frac{\ln(1 + B_p)}{B_p} \quad (6.18) \quad B_d = \frac{Y_1^* - Y_1}{1 - Y_1^*} \quad (6.19)$$

avec Re_p et Sc le nombre de Reynolds de la particule Eq.(6.20), et de Schmidt du gaz ambiant Eq.(6.21) :

$$Re_p = \frac{\rho_g |u + u' - v| d}{\mu_g(\hat{T})} \quad (6.20) \quad Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g \mathcal{D}_g} \quad (6.21)$$

avec $\mu_g(\hat{T})$ la diffusivité du gaz à une température $\hat{T} = 1/3(T_g + 2T_p)$. Le nombre de Schmidt est calculé à partir de la relation $\rho_g \mathcal{D}_g = 1.293 D_0 (\hat{T}/273)^{n_0-1}$ utilisant des paramètres empiriques n_0 et D_0 . Le paramètre Y_1^* représente la fraction massique de l'espèce liquide évaporée (ici le carburant $Y_{C_{12}H_{26}}$) dans la cellule, et Y_1^* la fraction à la surface de la particule telle que Eq.(6.22) :

$$Y_1^* = \frac{\mathcal{W}_{n-C_{12}H_{26}}}{\mathcal{W}_{n-C_{12}H_{26}} + \mathcal{W} \left(\frac{p}{p_{sat}(T_d)} - 1 \right)} \quad (6.22)$$

avec p la pression dans la cellule, $p_{sat}(T_d)$ la pression de saturation de l'espèce liquide à la température de la particule.

6.3.7 Turbulence

Le modèle Sigma proposé par Baya Toda et al. [121] est utilisé ici. La viscosité de sous-maille s'écrit comme Eq.(6.23) :

$$\nu_t = C_\sigma^2 \Delta_x^2 D_\sigma \quad (6.23)$$

avec C_σ une constante du modèle, Δ_x la taille de maille, et D_σ s'exprimant à partir du tenseur de Reynolds, et s'écrivant comme Eq.(6.24) :

$$D_\sigma = \frac{\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)}{\sigma_1^2} \quad (6.24)$$

avec σ_i la $i^{\text{ème}}$ valeur propre du tenseur de Reynolds. Le modèle Sigma implique une décroissance naturelle du produit $\sigma_3(\sigma_1 - \sigma_2)(\sigma_2 - \sigma_3)$ lorsque la distance à la paroi diminue. Dans le cas d'écoulements 2D (cisaillement pur, rotation pure), le modèle ne prévoit aucune viscosité tourbillonnaire ($\sigma_3 = 0$), de même que dans le cas de dilatation/contraction pure ($\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3$).

6.3.8 Qualité de la LES

La qualité de la LES est discutée d'un point de vue du ratio entre la viscosité laminaire ν et tourbillonnaire ν_t à trois instants clefs $t = 0.50\text{ms}$, $t = 1.00\text{ms}$, et $t = 1.50\text{ms}$, correspondant approximativement à la fin de l'injection (pour rappel $\tau_{inj} = 0.45\text{ms}$), à l'apparition de l'AI de flamme froide (LTC), et l'apparition de l'AI de flamme chaude (HTC), respectivement.

Les fortes vitesses (environ 200m/s) accompagnant l'injection entraînent des valeurs ν_t/ν de l'ordre de 100, indiquant que les structures turbulentes sont globalement non-résolues sur les maillages utilisés Fig.6.5a et 6.6a. Les vitesses décroissent ensuite de façon monotone, à l'instar de ν_t/ν rejoignant des valeurs de l'ordre de 10 entre $t = 1.00\text{ms}$ et $t = 2.00\text{ms}$ indiquant qu'une plus grande partie de l'écoulement est résolue Fig.6.5b, 6.5c, 6.6b et 6.6c.

En outre, l'utilisation d'un maillage plus fin ($\Delta_x = 150\mu\text{m}$) n'entraîne pas une réduction significative des ratios ν_t/ν , suggérant qu'un maillage largement plus fin serait requis pour assurer une résolution substantiellement meilleure de l'écoulement. Une telle étude serait très coûteuse en temps et en ressources informatiques, et n'a donc pas été effectuée.

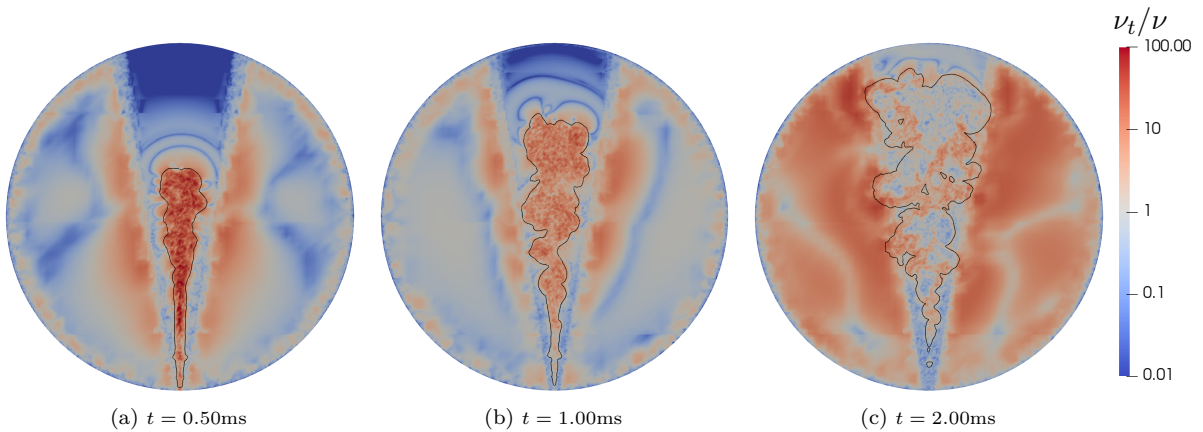
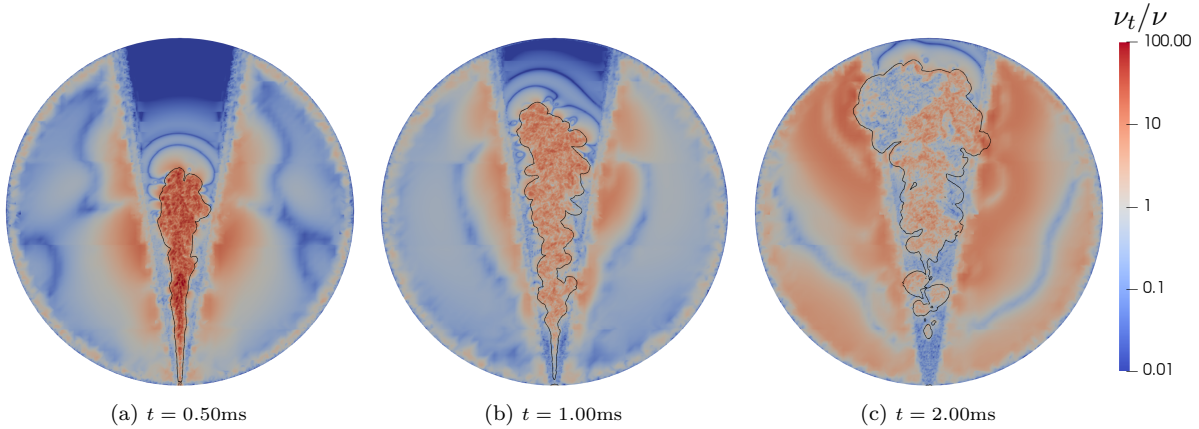
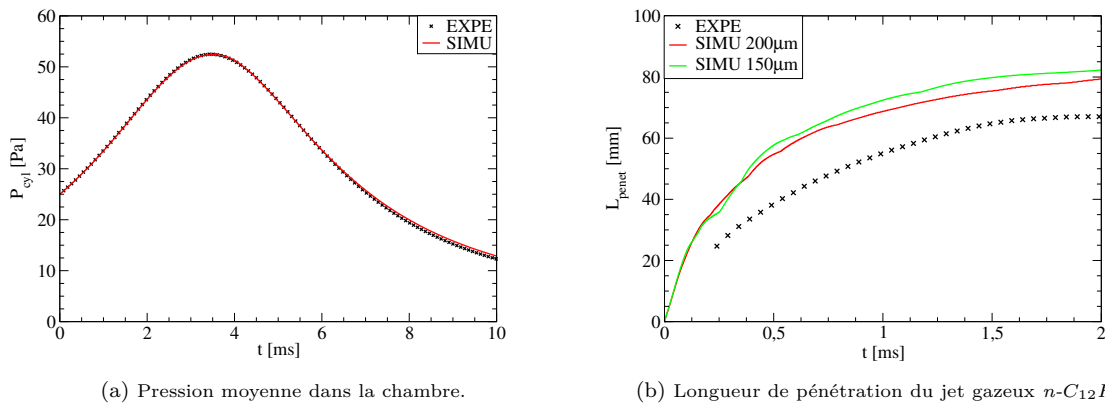


FIGURE 6.5 – Champs de viscosité tourbillonnaire ν_t/ν à différents instants - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$.

FIGURE 6.6 – Champs de viscosité tourbillonnaire ν_t/ν à différents instants - $\Delta_x = 150\mu\text{m}$.

6.4 Calage en conditions non-réactives

FIGURE 6.7 – Comparaison numérique/expérimental sur un cas non-réactif. La pression cylindre est correctement reproduite, tandis que la pénétration du jet gazeux $n\text{-C}_{12}\text{H}_{26}$ pilote est surestimée par rapport à l'expérience.

6.4.1 Pression

La pression d'un cycle compression-détente sans combustion permet de discuter la représentativité de la course appliquée aux simulations numériques Fig.6.7a. La course numérique est basée sur celle de l'expérience, et ajustée de façon à prendre en compte les différents volumes morts de la chambre. Des écarts de l'ordre de 1.0bar ont été notés sur la phase de détente, vraisemblablement en raison de deux principaux effets : (i) aucun modèle de perte de masse (blow-by) n'est utilisé, (ii) aucune validation des échanges thermiques aux parois n'est réalisée.

Ces deux paramètres ont été artificiellement pris en compte via la longueur empirique \mathcal{L}_{emp} ajoutée à la trajectoire théorique du piston, afin d'approcher au mieux la pression expérimentale du cas non-réactif. Cependant, la course du piston dépend du différentiel de pression de part et d'autre du piston (i.e. entre la chambre et le système hydraulique), et varie donc en fonction du point de fonctionnement. De fait, la course utilisée pour les calculs réactifs est différente de celle des calculs non-réactifs. Bien que les effets de flux thermiques et massiques n'aient aucune raison d'être les semblables en conditions réactives et non-réactives, la même longueur empirique \mathcal{L}_{emp} (pour rappel calculée sur un cas non-réactif), est ajoutée à la trajectoire théorique du cas réactif. Au final, la course corrigée appliquée au calcul numérique permet de reproduire la pression expérimentale pour le cas non-réactif, à 0.2bar près.

6.4.2 Pénétration du jet pilote gazeux

La pénétration du jet pilote gazeux est mesurée expérimentalement grâce au contour du signal Schlieren Fig.6.7b. Pour les simulations, celle-ci est mesurée via une fraction massique de carburant faible, ici égale $Y_{n-C_{12}H_{26}} = 1.0 \times 10^{-6}$. Les mesures expérimentales sont biaisées par les frontières de la fenêtre de visualisation s'étendant de $y \approx 18\text{mm}$ à $y \approx 68\text{mm}$, empêchant l'observation du jet en dehors de ces valeurs. Cela explique l'absence de valeurs expérimentales en début d'injection, ainsi que le plateau observé à partir de $t \approx 2.0\text{ms}$. Toutefois, la fenêtre exploitable (i.e. avant $t \approx 2.0\text{ms}$) affiche une surestimation de la longueur de pénétration de l'ordre de 15% pour le calcul numérique.

6.4.3 Richesse

Une comparaison à froid permet de discuter l'allure générale du jet. Ainsi, les différences expérience/simulation des cas réactifs imputables à la modélisation de la combustion, peuvent être distinguées de celles provenant d'effets purement aérodynamiques.

Des mesures de richesse à froid permettent l'étude de la zone de mélange, en termes de richesse. Il est souligné que la richesse est calculée d'une façon particulière, en raison de la composition en N_2 pur de la chambre. La richesse est alors calculée en considérant la présence d'un pré-mélange air/ CH_4 à une richesse $\phi_{CH_4} = 0.58$, et non le diazote effectivement présent dans la chambre (qui conduirait à une richesse infinie). La dispersion du jet est considérée indépendante de la composition de la chambre. Une comparaison visuelle avec les résultats numériques est réalisée à des niveaux de résolution de $150\mu\text{m}$ et $200\mu\text{m}$, et aux instants de $t = 0.3\text{ms}$, $t = 0.7\text{ms}$, et $t = 1.5\text{ms}$, Fig.6.8 à 6.10. Ces instants renseignent sur l'allure du jet pendant l'injection ($\tau_{inj} = 0.45\text{ms}$), et peu avant l'apparition de la chimie de flamme froide (LTC), et de flamme chaude (HTC) des cas réactifs. L'injection s'accompagne d'une richesse maximale $\phi_{max} \approx 8.0$, qui décroît autour de $\phi_{max} \approx 2.0$ et $\phi_{max} \approx 1.3$ à $t = 0.7\text{ms}$ et $t = 1.5\text{ms}$, respectivement. En dépit d'écarts substantiels en termes de longueur de pénétration, l'ouverture du jet ainsi que les richesses sont comparables entre le cas expérimental et le calcul numérique. Également, ces grandeurs ainsi que l'allure du jet sont peu sensibles à la variation de résolution.

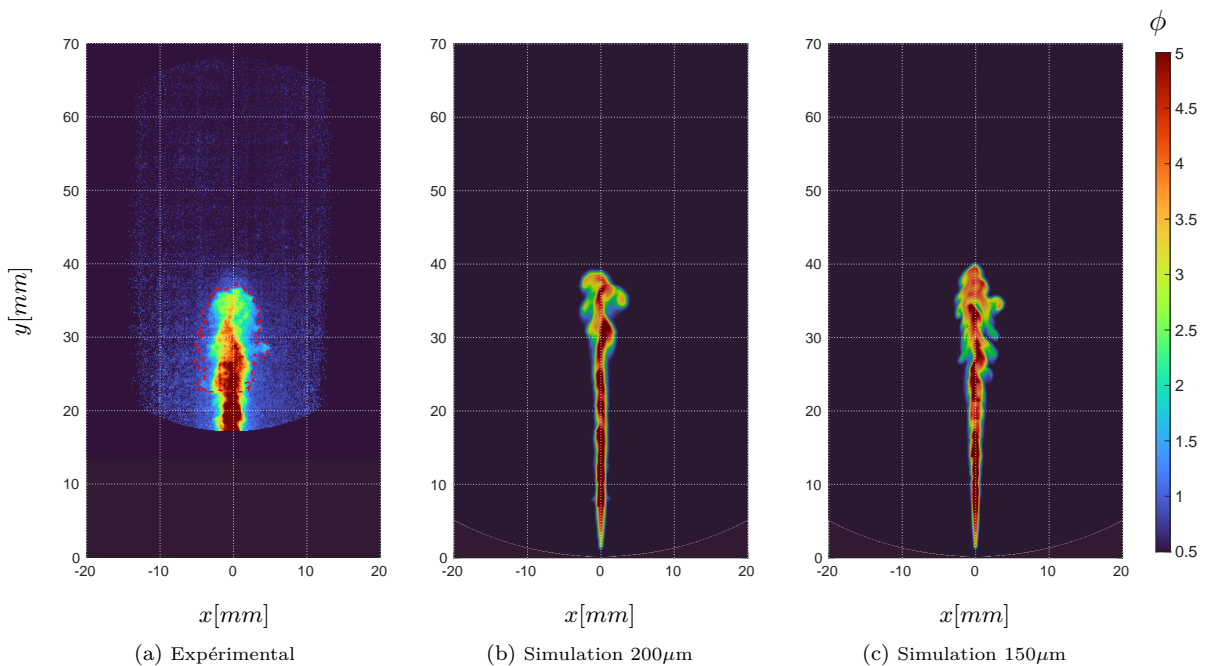


FIGURE 6.8 – $t = 0.3\text{ms}$: Champs de richesse à un instant pendant l'injection. La richesse maximale au centre du jet est telle que $\phi_{max} \approx 8.0$. La longueur de pénétration diffère d'environ 5mm entre l'expérience et les simulations à $\Delta_x = 150\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 200\mu\text{m}$. Le contour du jet expérimental issu du signal Schlieren est surligné en rouge.

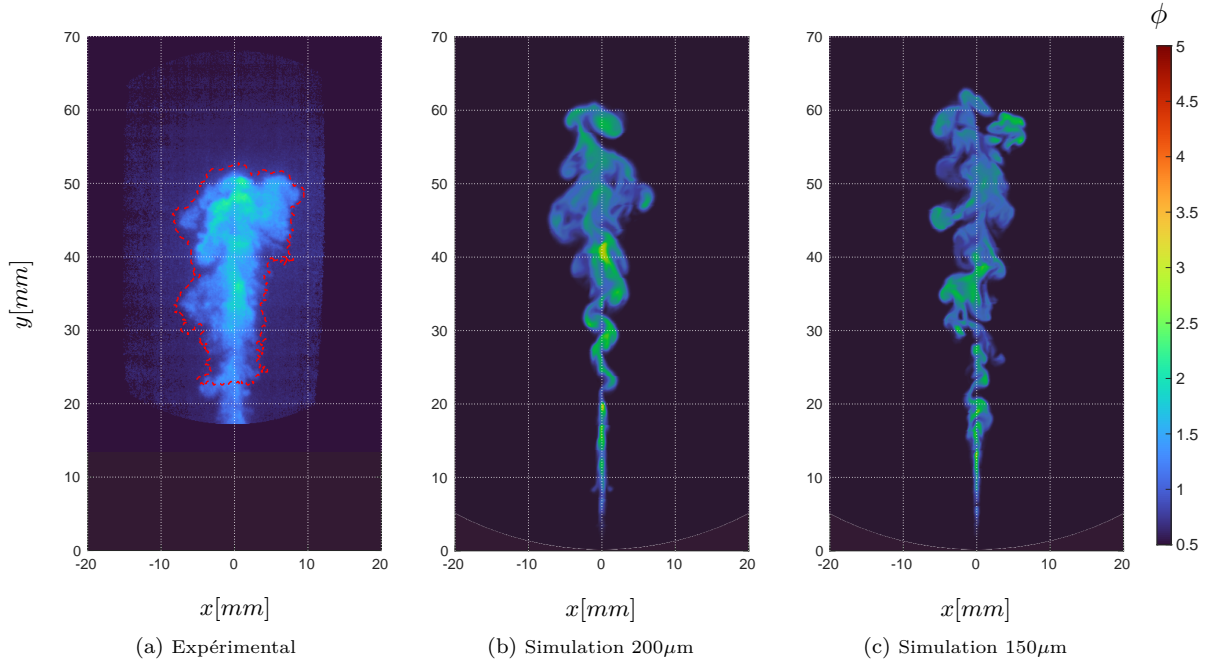


FIGURE 6.9 – $t = 0.7\text{ms}$: Champs de richesse peu avant l'apparition de la flamme froide du cas réactif. La richesse maximale se situe autour de $\phi_{max} \approx 2.5$. La longueur de pénétration diffère d'environ 10mm entre l'expérience et les simulations à $\Delta_x = 150\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 200\mu\text{m}$. Le contour du jet expérimental issu du signal Schlieren est surligné en rouge.

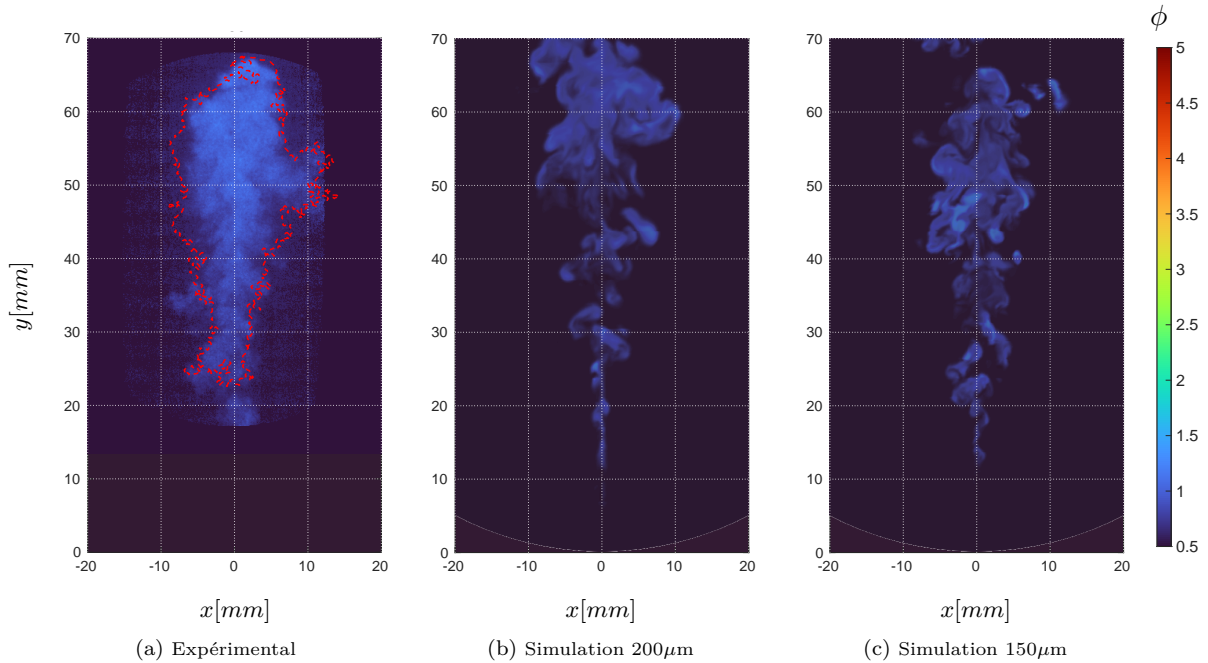


FIGURE 6.10 – $t = 1.5\text{ms}$: Champs de richesse peu avant l'apparition de la flamme chaude du cas réactif. La richesse maximale se situe autour de $\phi_{max} \approx 1.5$. Le jet expérimental est proche de la frontière de visualisation supérieure à $y \approx 68\text{mm}$. Le jet numérique dépasse cette longueur d'environ 15mm (non-visible sur les figures présentes en raison de la fenêtre de visualisation). Le contour du jet expérimental issu du signal Schlieren est surligné en rouge.

6.5 Évaluation des différents modèles de combustion en conditions réactives

Dans cette section, les calculs *no-model*, TFM-M0, TFM-M2_{destr} et TKI-ECFM sont comparés sur un cas réactif Fig.6.3b :

- Le calcul *no-model* sert de référence pour le régime d'AI. La résolution des calculs étant insuffisante pour représenter la propagation d'un front de flamme pré-mélangée, le comportement du calcul *no-model* n'est étudié que pour le régime d'auto-inflammation.
- Le calcul TFM-M0 permet d'évaluer l'influence du facteur d'épaississement sur l'AI, et plus particulièrement sa propension à retarder l'allumage, comme discuté en section 5.5.2.
- Le calcul TFM-M2_{destr} permet d'évaluer la capacité du modèle M2_{destr} à traiter les phénomènes de transition AI→déflagration. Sa capacité à reproduire les caractéristiques de TFM-M0 durant le régime de déflagration, tout en reproduisant le comportement du calcul *no-model* durant l'AI sont discutés.
- Le calcul TKI-ECFM permet de discuter la capacité du modèle TKI à représenter l'AI en conditions stratifiées 3D Dual-Fuel, et évaluer le critère de dépôt de surface de flamme $\tilde{c}_{AI}^{seuil} > 0.5$ discuté en section 5.3.1 pour représenter la transition vers un régime de déflagration.

6.5.1 Calcul *no-model*, point de référence pour l'AI

6.5.1.1 Comportement global

L'injection de carburant pilote s'effectue sur une durée $\tau_{inj} = 0.45\text{ms}$. L'évaporation du jet est très rapide puisqu'à $t = 0.50\text{ms}$, la quasi-totalité du jet est évaporée Fig.6.13. De multiples noyaux d'AI (HTC) apparaissent de façon dispersée dans le sillage du jet autour de $t = 1.8\text{ms}$, soit longtemps après l'évaporation du spray. De fait, aucune interaction spray/combustion n'est attendue.

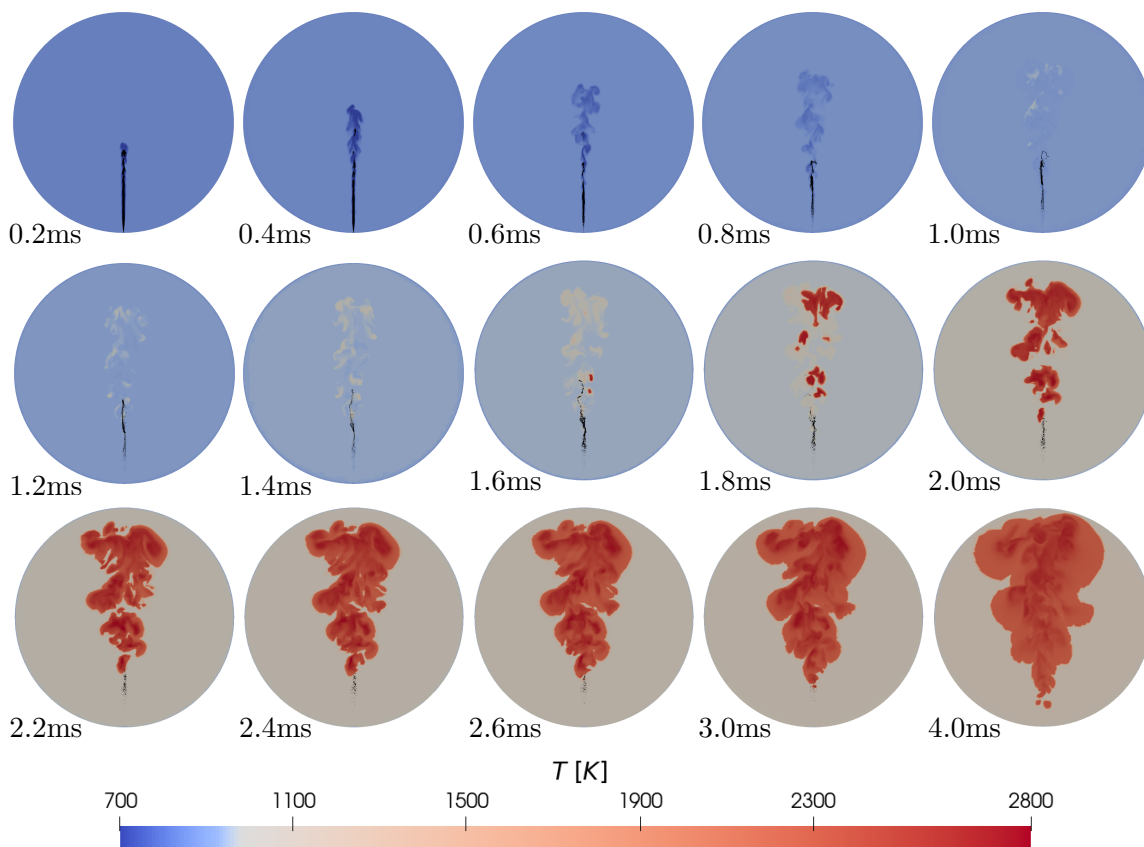
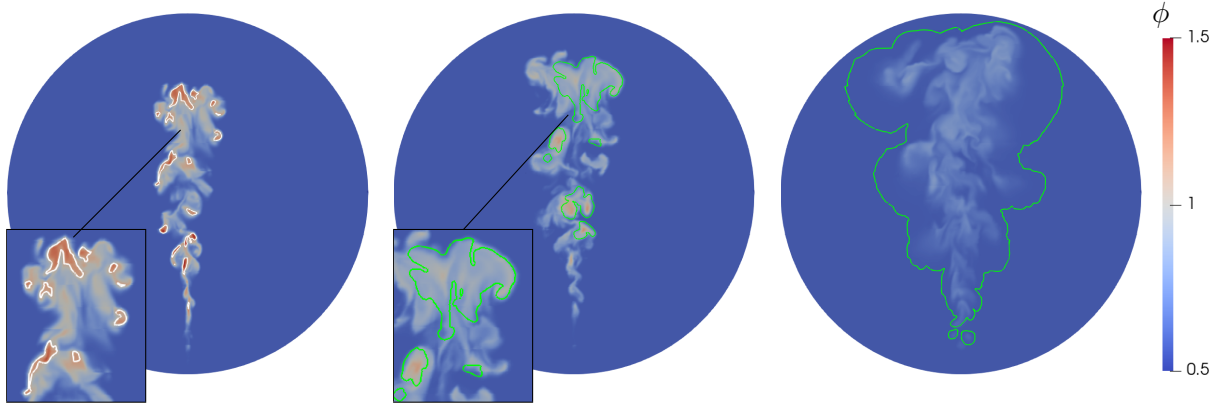


FIGURE 6.11 – Calcul *no-model* : Évolution temporelle du champ de température pour le calcul *no-model*. Les premiers points d'AI de flamme froide (TC) apparaissent autour de $t = 1.0\text{ms}$, et l'AI de flamme chaude (HTC) autour de $t = 1.8\text{ms}$. Les particules lagrangiennes sont représentées en noir.

Durant l'injection, la richesse maximale au centre du jet avoisine $\phi_{max} = 8.0$, tout comme pour le cas non-réactif. Toutefois, l'injection courte favorise une dispersion rapide du jet, formant un pré-mélange air/ CH_4 / n -dodécane faiblement stratifié au moment de l'AI. Ainsi, l'AI de flamme froide (LTC) apparaît autour de $\phi_{max} = 1.5$ Fig.6.12a, et l'AI de flamme chaude (HTC) autour de $\phi_{max} = 1.3$ Fig.6.12b dans les régions où la concentration en n -dodécane est maximale (i.e. $Z_{MR} = Z_{max}$).



(a) $t = 1.2\text{ms}$: AI flamme froide (LTC) initiée autour de $\phi = 1.5$. (b) $t = 1.8\text{ms}$: AI flamme chaude (HTC) initiée autour de $\phi = 1.3$. (c) $t = 4.0\text{ms}$: Propagation front de flamme (sous-résolue) côté méthane.

FIGURE 6.12 – Calcul *no-model* : Champs de richesse à différents instants clefs. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Une forte diminution de la richesse maximale locale suit la fin de l'injection.

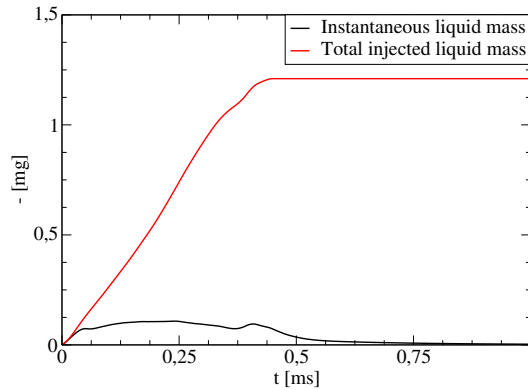


FIGURE 6.13 – Calcul *no-model* : Comparaison temporelle entre la masse de carburant totale injectée et la masse de carburant liquide instantanée. La masse liquide instantanée est dominée par la masse totale injectée après $t = 0.45\text{ms}$, correspondant à la fin de l'injection, et traduisant une évaporation rapide du spray une fois l'injection terminée.

6.5.1.2 Caractéristiques du mélange

Les gradients de mélange lors de l'AI de flamme froide (LTC) Fig.6.14b et chaude (HTC) Fig.6.14c sont tels que $|\nabla Z| \approx 50\text{m}^{-1}$. Cela équivaut aux valeurs rencontrées dans les cas 1D B15 et B60 (chapitre 5). Ces gradients de mélange et la pression à l'allumage de l'ordre de 40bar situent ce cas 3D entre les conditions de B15 et B60, pour lesquels l'AI est dominée par le terme réactif (section 4.2.6.2). Cela suggère que l'AI est essentiellement réaction-dépendante, et qu'une interaction diffusion/réaction similaire à celle notée pour A15 (effets de dissipation scalaire) est peu probable. Le comportement de l'AI est donc supposé assimilable à un ensemble de réacteurs 0D indépendants répondant aux hypothèses de la théorie de Zeldovich [136]. Toutefois, aucune prise en compte des gradients de sous-maille n'étant permise par une approche *no-model*, la proximité avec les cas B15 et B60 est donc à mitiger puisqu'elle se limite aux gradients résolus.

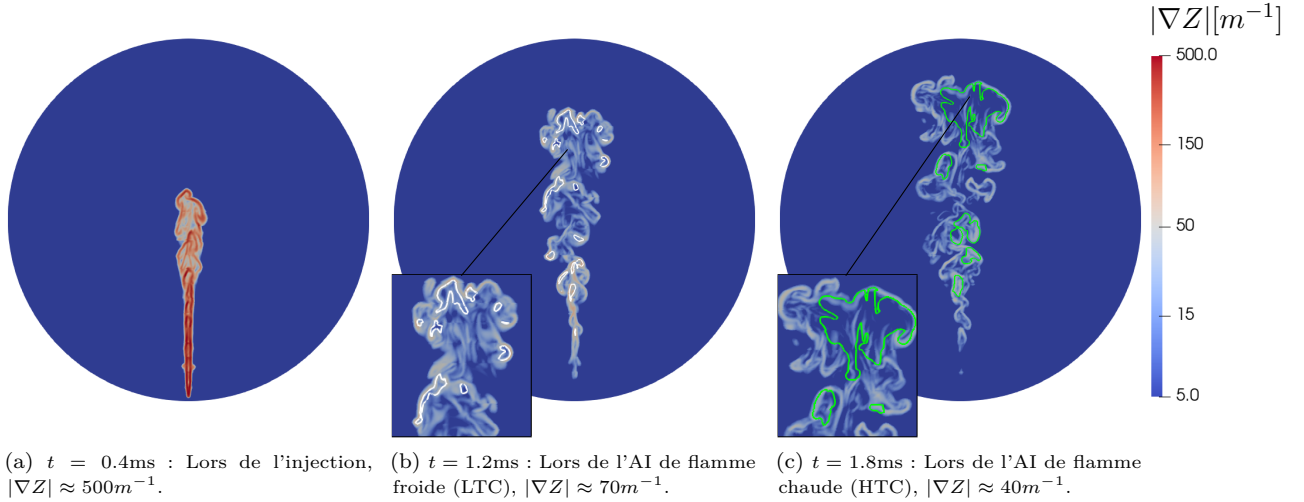


FIGURE 6.14 – Calcul *no-model* : Champs de gradients de mélange $|\nabla Z|$ à différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Des valeurs de l'ordre de $|\nabla Z| = 500\text{m}^{-1}$ sont rencontrées en périphérie du jet ($t = 0.4\text{ms}$) durant l'injection. L'AI de flamme froide et chaude s'opèrent dans des conditions plus faiblement stratifiées, telles que $|\nabla Z| \approx 50\text{m}^{-1}$.

6.5.1.3 Étude *a priori* sur l'AI

L'étude fondamentale 1D du chapitre 4 montre que la comparaison des vitesses S_{AI} et S_L fournit une information pertinente et exploitable pour définir le régime de combustion dominant. Pour rappel, des valeurs $S_{AI} \gg S_L$ indiquent la dominance d'un régime d'AI, tandis que des valeurs $S_{AI} \approx S_L$ indiquent une transition assez spontanée vers un régime de déflagration, une fois l'AI (HTC) survenue. De fait, les valeurs $S_{AI}/S_L \approx 1.0$ rencontrées dans le cas présent Fig.6.15 suggèrent une transition relativement spontanée vers un régime de déflagration. Un régime de propagation d'AI auto-entretenu (caractérisé par une dominance prolongée du terme réactif) n'est donc pas attendu au vu des conditions locales de réactivité.

Néanmoins, malgré des vitesses S_{AI} modérées dès l'apparition des premiers noyaux d'AI de flamme chaude ($t \approx 1.7\text{ms}$), l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée piloté par un équilibre diffusion/réaction n'est, comme discuté au chapitre 4, pas instantané. Or, le maillage présent ne permettant pas la résolution d'un front de flamme pré-mélangée, la condition $\delta_{reac} \approx \delta_L$, de même que la vitesse de déplacement S_d ou le bilan diffusion/réaction utilisés au chapitre 4 pour identifier un régime de déflagration ne sont pas applicables ici. L'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée n'est donc pas formellement identifiable.

Toutefois, le calcul 3D présent affiche une relative proximité avec les cas 1D B15 et B60 (chapitre 5), impliquant des transitions AI→déflagration sur des durées de l'ordre de 1.0ms. Ainsi, par similarité, l'établissement d'un régime de déflagration est attendu ici - très approximativement - 1.0ms après l'AI de flamme chaude (HTC), soit aux alentours de 2.8ms. Ce calcul *no-model* peut donc, de façon *a priori*, être considéré valide jusqu'aux alentours de $t = 2.8\text{ms}$. À noter cependant que des phénomènes de sous-résolution du front, biaisant la validité du calcul, peuvent survenir avant $t = 2.8\text{ms}$, si la contraction du front accompagnant la transition AI→déflagration atteint un seuil critique, comme discuté en section 5.4. La validité du calcul *no-model* est donc difficilement quantifiable, mais est considérée acceptable entre $t = 0.0\text{ms}$ et $t = 2.8\text{ms}$.

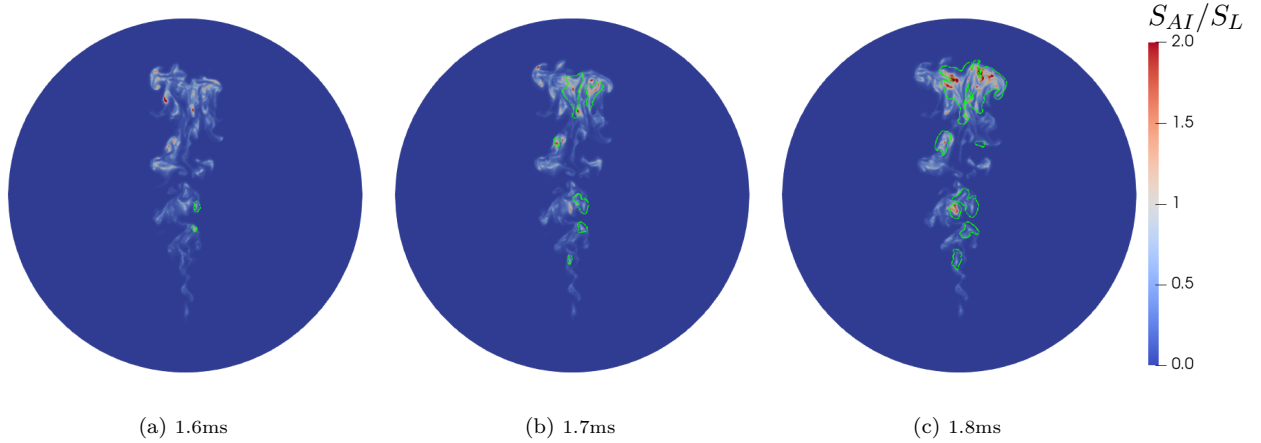


FIGURE 6.15 – Calcul *no-model* : Comparaison entre la vitesse de flamme laminaire S_L et la vitesse théorique S_{AI} d'un front d'AI. Les instants sélectionnés correspondent aux premiers instants de l'AI de flamme chaude (HTC). Les valeurs à interpréter se situent côté GF, l'iso-valeur $c = 0.5$ permet la distinction GF/GB. Les valeurs S_{AI}/S_L de l'ordre de l'unité démontrent une propagation d'AI lente.

6.5.2 Calcul TFM-M0, difficultés à représenter la transition AI→déflagration

Les paramètres utilisés dans le calcul TFM-M0 sont rappelés dans le tableau Tab.6.1. La fonction d'efficacité utilisée est celle de Charlette [22] décrite en section 3.3.3.

Paramètre	Rôle	Valeur
α_{cold}	Relax $\hat{S} \rightarrow 0$ côté GF	0.5
α_{hot}	Relax $\hat{S} \rightarrow 0$ côté GB	0.05
β	Sensibilité \mathcal{S}_{NF}	4
n_{res}	Résolution du front	5
ψ_0	Valeur cible de ψ dans le front	20

FIGURE 6.16 – Tableau récapitulant les paramètres utilisés dans le calcul TFM-M0.

6.5.2.1 Comportement global

Le calcul TFM-M0 est identique au calcul *no-model* jusqu'aux alentours de $t \approx 1.6$ ms. En effet, le dégagement de chaleur est trop faible pour entraîner l'activation du senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} et de facto l'application du facteur d'épaississement. Ainsi, la dispersion du jet et l'apparition de l'AI de flamme froide (LTC) à $t = 1.0$ ms ne sont pas impactées par le facteur d'épaississement, et sont identiques au calcul *no-model*.

Toutefois, le comportement des calculs *no-model* et TFM-M0 diverge à partir des premiers points d'AI de flamme chaude (HTC) à $t = 1.6$ ms. En effet, alors que l'AI survient autour de $t = 1.8$ ms pour le calcul *no-model* Fig.6.12b, celle-ci survient autour de $t = 2.4$ ms pour TFM-M0 Fig.6.18b. Cet écart temporel est considérable car il représente 5 à 10 degrés vilebrequin en conditions typiques moteur. L'apparition de l'AI de flamme froide (LTC) et chaude (HTC) surviennent dans les régions les plus riches (i.e. $Z_{MR} = Z_{max}$) tout comme pour le calcul *no-model*, mais l'AI (HTC) subit un fort retard dû à l'application du facteur d'épaississement. Cela atténue le développement des noyaux d'AI et entraîne une sous-estimation du dégagement de chaleur Fig.6.34.

Par ailleurs, les gradients de mélange proches de ceux de B15 et B60 ($|\nabla Z| \approx 50m^{-1}$) suggèrent une dissipation du dégagement d'énergie par intensification des effets diffusifs, relativement modérée. Au regard de l'étude menée au chapitre 5 (section 5.5.2), des gradients de mélange supérieurs favoriseraient a priori une augmentation des délais d'AI encore plus forte, appuyant le besoin d'une modélisation de la transition AI→déflagration en contexte TFM.

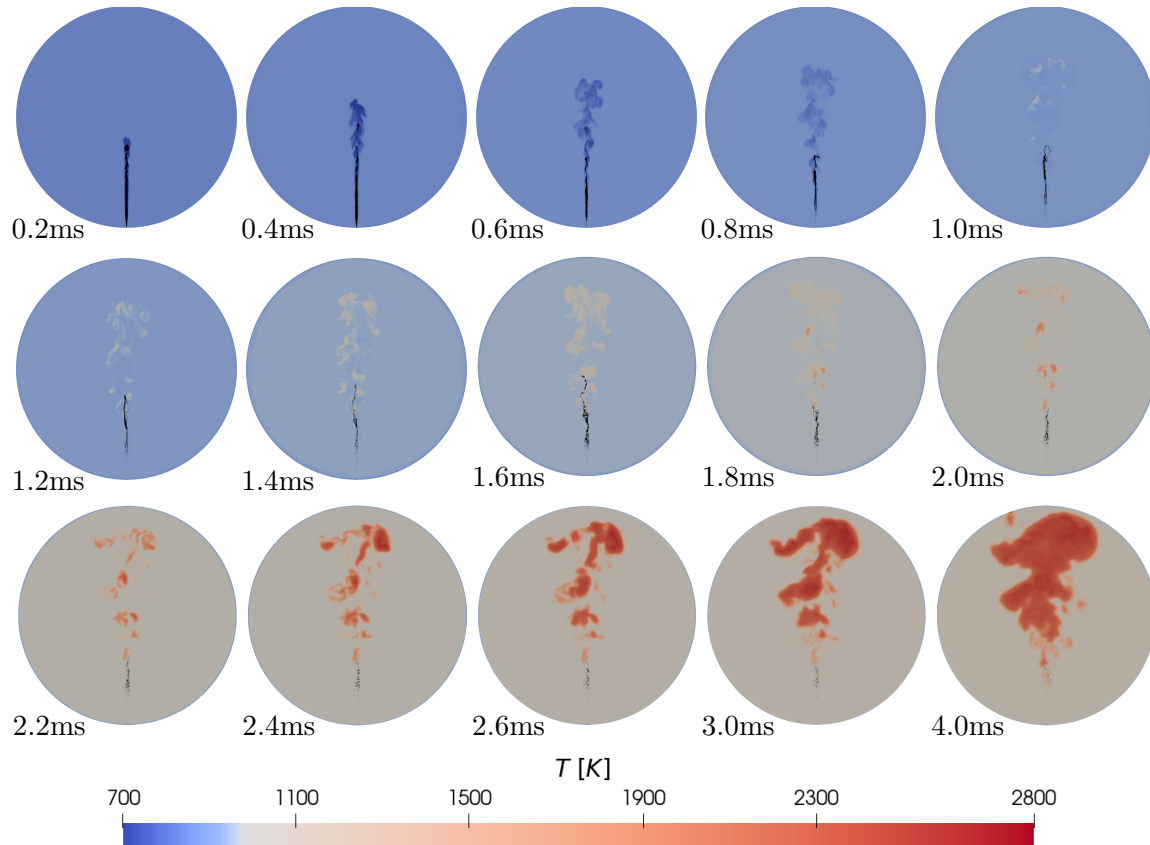
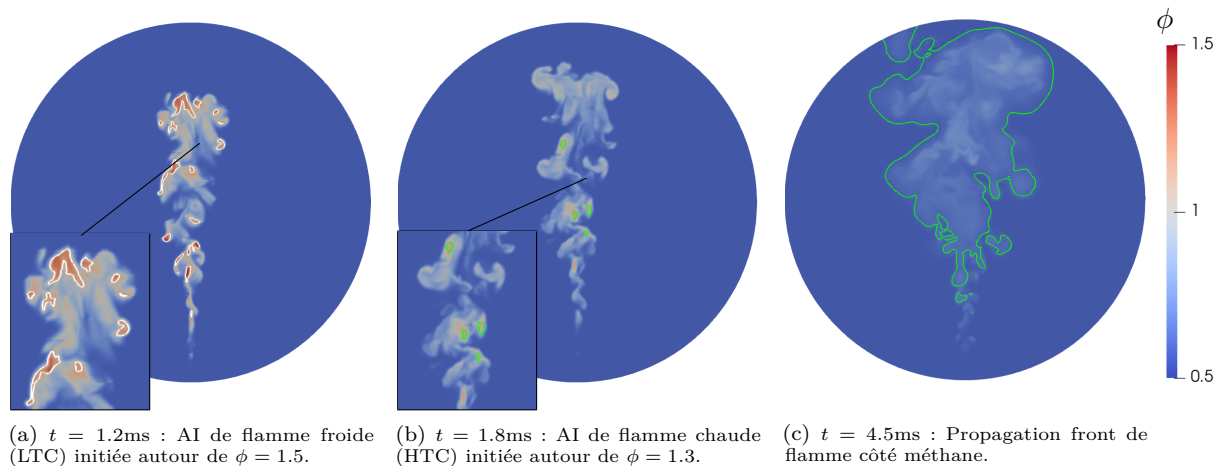


FIGURE 6.17 – Calcul TFM-M0 - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Évolution temporelle du champ de température pour M0. Les premiers points d'AI de flamme froide apparaissent autour de $t = 1.0\text{ms}$, et l'AI de flamme chaude autour de $t = 2.4\text{ms}$ contre $t = 1.8\text{ms}$ pour le calcul *no-model*. Les particules Lagrangiennes sont représentées en noir.



(a) $t = 1.2\text{ms}$: AI de flamme froide (LTC) initiée autour de $\phi = 1.5$. (b) $t = 1.8\text{ms}$: AI de flamme chaude (HTC) initiée autour de $\phi = 1.3$. (c) $t = 4.5\text{ms}$: Propagation front de flamme côté méthane.

FIGURE 6.18 – Calcul TFM-M0 - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Champs de richesse à différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Une forte diminution de la richesse maximale locale suit la fin de l'injection.

6.5.2.2 Comportement du modèle

Des champs représentatifs des variables \mathcal{S}_{NF} (senseur de réaction), $\hat{\mathcal{S}}$ (senseur final) et \mathcal{F} sont présentés Fig.6.19 à 6.21. Les instants sélectionnés sont associés à l'apparition des premiers noyaux d'AI de flamme chaude ($t = 1.8\text{ms}$), au pic de dégagement d'énergie associé à l'AI de flamme chaude ($t = 2.6\text{ms}$), et à la propagation du

front de flamme épaissie côté méthane ($t = 4.5\text{ms}$).

Dans TFM-M0, \mathcal{S}_{NF} est incapable de distinguer le dégagement d'énergie d'un noyau d'AI, de celui d'une flamme pré-mélangée. Dans le cas présent, les réactions de flamme froide (LTC) sont peu exothermiques et n'entraînent pas l'activation de \mathcal{S}_{NF} (et par conséquent aucun facteur d'épaississement). À l'inverse, les réactions de flamme chaude (HTC) sont perçues comme des éléments de surface de flamme, et activent le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} Fig.6.19a. Celui-ci entraîne à son tour l'application instantanée du facteur d'épaississement \mathcal{F}_{target} , inhibant la réactivité sur l'ensemble du jet Fig.6.21a et 6.21b. Le jet s'apparente alors à un large noyau d'AI dissipé par sur-diffusivité Fig.6.21b.

Par la suite, le facteur d'épaississement \mathcal{F}_{target} n'intervient qu'à l'interface GF/GB en périphérie du jet Fig.6.21c. Ce changement de structure notable est attribué à l'établissement d'un front de flamme épaissie représentatif d'un régime de déflagration.

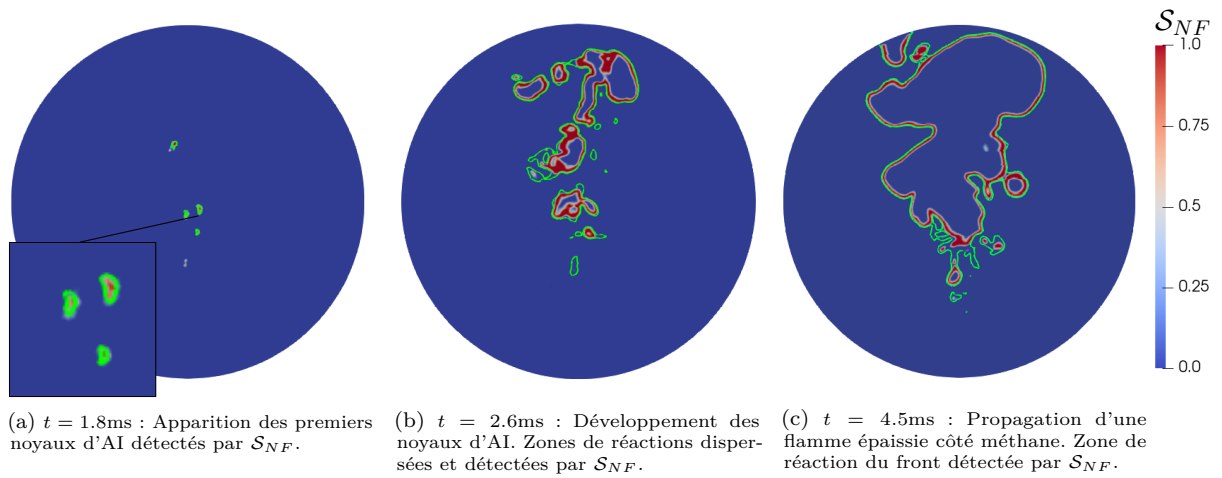


FIGURE 6.19 – Calcul TFM-M0 - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} à différents instants clefs. \mathcal{S}_{NF} détecte les premiers noyaux d'AI de flamme chaude ($t = 1.8\text{ms}$) et les interprète comme des éléments de surface de flamme.

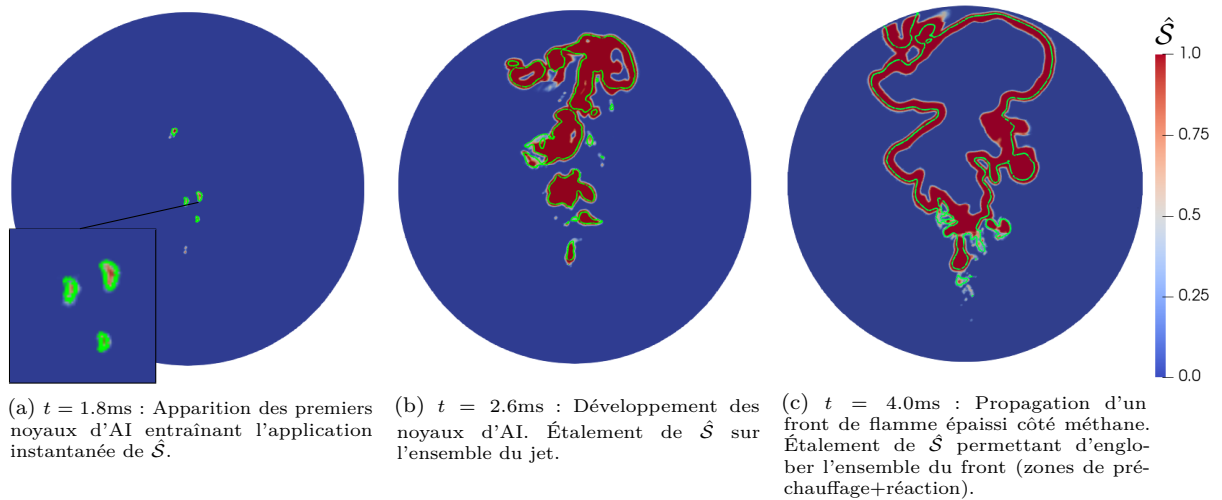
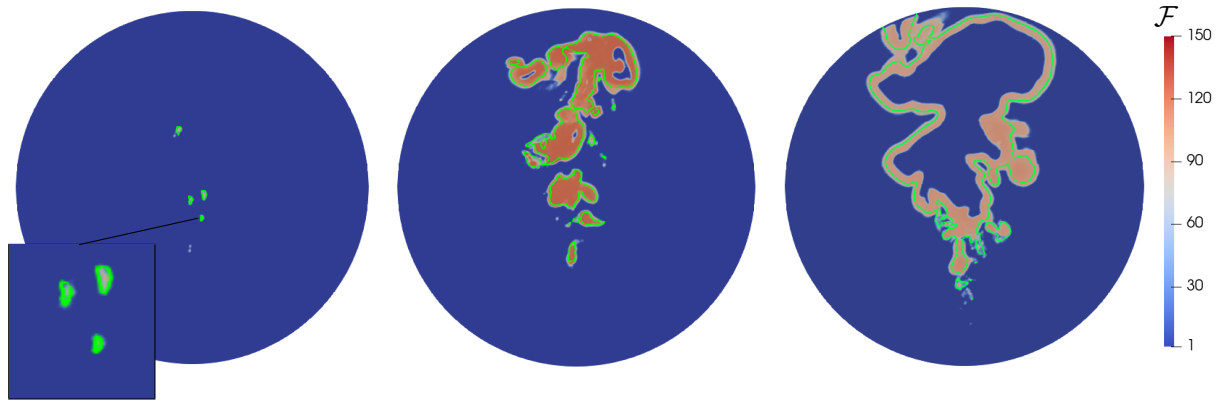


FIGURE 6.20 – Calcul TFM-M0 - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Senseur de réaction $\hat{\mathcal{S}}$ à différents instants clefs. L'allumage entraîne l'étalement de $\hat{\mathcal{S}}$ sur l'ensemble du jet ($t = 1.8\text{ms}$ et $t = 2.6\text{ms}$).



(a) $t = 1.8\text{ms}$: Apparition des premiers noyaux d'AI inhibés par le facteur d'épaississement.

(b) $t = 2.6\text{ms}$: Développement des noyaux d'AI. Le facteur \mathcal{F}_{target} s'applique en masse à l'ensemble du jet.

(c) $t = 4.0\text{ms}$: Propagation d'un front de flamme épaissi côté méthane. Le facteur d'épaississement permet la résolution du front sur le maillage LES.

FIGURE 6.21 – Calcul TFM-M0 - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Facteur d'épaississement dynamique \mathcal{F} pour différents instants clefs. Le facteur d'épaississement intervient dès l'apparition des premiers noyaux d'AI de flamme chaude ($t = 1.8\text{ms}$). L'épaississement nominal est tel que $\mathcal{F}_{target}^{st} = 120$ et $\mathcal{F}_{target}^{CH_4} = 90$ respectivement à la stoechiométrie, et dans le pré-mélange air/ CH_4 .

6.5.3 Calcul TFM-M2_{destr}, apport d'une modélisation de la transition AI→déflagration

Les paramètres utilisés dans le calcul TFM-M2_{destr} sont rappelés dans le tableau Tab.6.1. La fonction d'efficacité utilisée est celle de Charlette [22] décrite en section 3.3.3.

Paramètre	Rôle	Valeur
α_{cold}	Relax $\hat{S} \rightarrow 0$ côté GF	0.5
α_{hot}	Relax $\hat{S} \rightarrow 0$ côté GB	0.05
β_{AI}	Sensibilité \mathcal{S}_{NF}	100
β_{deflag}	Sensibilité \mathcal{S}_{NF}	4
n_{res}	Résolution du front	5
ψ_0	Valeur cible de ψ dans le front	20
$\psi_{burntgas,0}$	Valeur cible de $\psi_{burntgas}$ dans le front	2
$\psi_{burntgas}^{seuil}$	Valeur seuil pilotant le terme $\dot{\omega}_{\psi}^- _{GB}$	0.05
c_{seuil}	Valeur seuil pilotant le terme $\dot{\omega}_{\psi}^+ _{GF}$	0.5
$\mathcal{R}_{flametime}$	Paramètre de relaxation pilotant le terme $\dot{\omega}_{\psi}^+ _{GF}$	0.3

TABLE 6.1 – Tableau récapitulant les paramètres utilisés dans les calculs TFM-M2_{destr}.

6.5.3.1 Comportement global

Le comportement global du calcul M2_{destr} est similaire à celui du calcul no-model jusqu'aux alentours de $t = 2.6\text{ms}$. En effet, comme décrit en section 6.5.3.6, le facteur d'épaississement prend globalement des valeurs proches de 1.0 lors de l'AI (HTC) survenant autour de $t = 1.8\text{ms}$, et relaxe vers \mathcal{F}_{target} durant la transition vers le mode déflagration, sur des durées de l'ordre de 1.0ms. De fait, les premiers instants de l'allumage sont peu influencés par le facteur d'épaississement, contrairement au calcul TFM-M0.

Ainsi, le comportement global du calcul TFM-M2_{destr} diverge de celui de TFM-M0 à partir de $t = 2.6\text{ms}$, en raison de l'application du facteur d'épaississement au front de réaction. De par sa proximité avec le calcul no-model aux premiers instants de l'allumage (section 6.5.1), le comportement du calcul TFM-M2_{destr} n'est pas discuté davantage, et seul le comportement du modèle est détaillé.

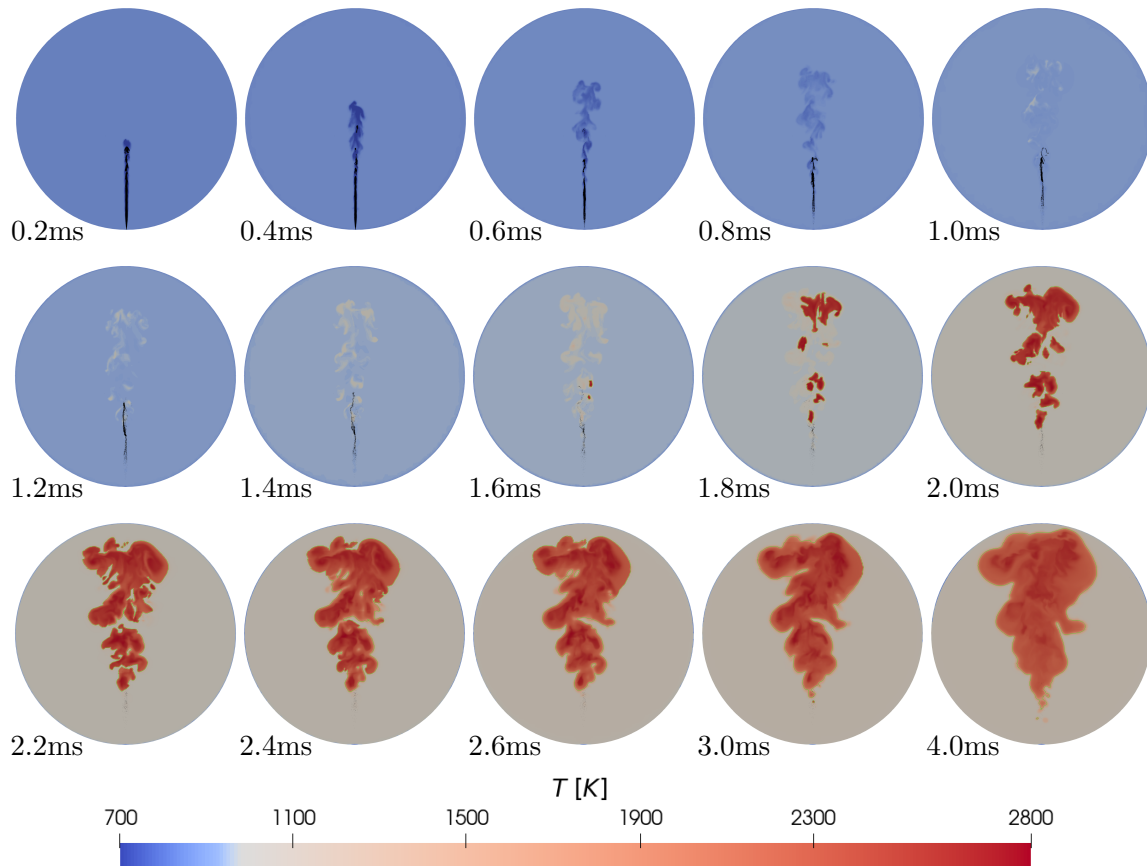
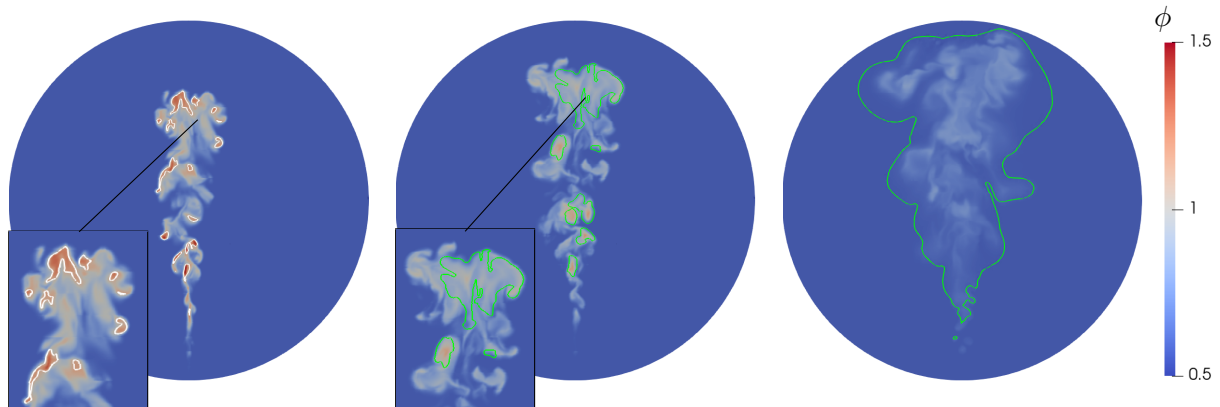


FIGURE 6.22 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta x = 200\mu\text{m}$: Évolution temporelle du champ de température pour M2_{destr}. Les premiers points d'AI de flamme froide apparaissent autour de $t = 1.0\text{ms}$, et l'AI de flamme chaude (HTC) globalement autour de $t = 1.8\text{ms}$, tout comme pour le calcul *no-model*. Les particules lagrangiennes sont représentées en noir.



(a) $t = 1.2\text{ms}$: AI flamme froide (LTC) initiée autour de $\phi = 1.5$. (b) $t = 1.8\text{ms}$: AI flamme chaude (HTC) initiée autour de $\phi = 1.3$. (c) $t = 4.0\text{ms}$: Propagation front de flamme côté méthane.

FIGURE 6.23 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta x = 200\mu\text{m}$: Champs de richesse à différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Une forte diminution de la richesse maximale locale suit la fin de l'injection.

6.5.3.2 Comportement du senseur de réaction \mathcal{S}_{NF}

Dans TFM-M2_{destr}, le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} subit une modification du paramètre de sensibilité β au cours de la transition du mode AI ($\beta_{AI} = 100$) vers le mode déflagration ($\beta_{defla} = 4$). Les états intermédiaires présentent une réactivité supérieure et sont mis en évidence par l'iso-valeur $c = 0.5$, Fig.6.24.

Ainsi, les zones d'activation de \mathcal{S}_{NF} montrent une très forte proximité avec les iso-valeurs $c = 0.5$ y compris aux premiers instants de l'AI de flamme chaude (HTC) où le mode AI ($\psi < 1.0$) s'applique à tout le domaine (corrélér Fig.6.24a et Fig.6.26a). Ainsi, malgré l'augmentation du paramètre de sensibilité β , l'activation de \mathcal{S}_{NF} reste cohérente avec la présence de zones de réaction. En d'autres termes, une valeur $\beta_{AI} \gg \beta_{defla}$ n'induit pas une détection hasardeuse d'éléments de surface de flamme/front d'AI dans des régions faiblement réactives (zones GF/GB), et ne semble pas problématique en termes de modélisation. Cette relative permissivité sur β est attribuée à la raideur des taux de réaction accompagnant un front de flamme/front d'AI, permettant à \mathcal{S}_{NF} de ne s'activer que dans des régions bien délimitées malgré une sensibilité accrue par β_{defla} .

En outre, la détection des éléments de surface de front semble continue, et aucun phénomène d'intermittence, comme décrit en section 5.5.5, n'est remarqué. Tout comme dans les cas 1D discutés au chapitre 5, la stratégie visant à augmenter la sensibilité de \mathcal{S}_{NF} permet d'assurer la détection du front de réaction indépendamment de sa (sous-)résolution. Cette détection entraîne un dépôt de ψ continu (pour rappel moyennant $c > 0.5$ et $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$) permettant la transition vers le mode déflagration ($\psi > 1.0$). Un épaissement des zones d'activation de \mathcal{S}_{NF} accompagnant la transition AI→déflagration est remarqué, et attribué à l'accroissement du facteur d'épaissement, voir encadrés Fig.6.24b et 6.24c.

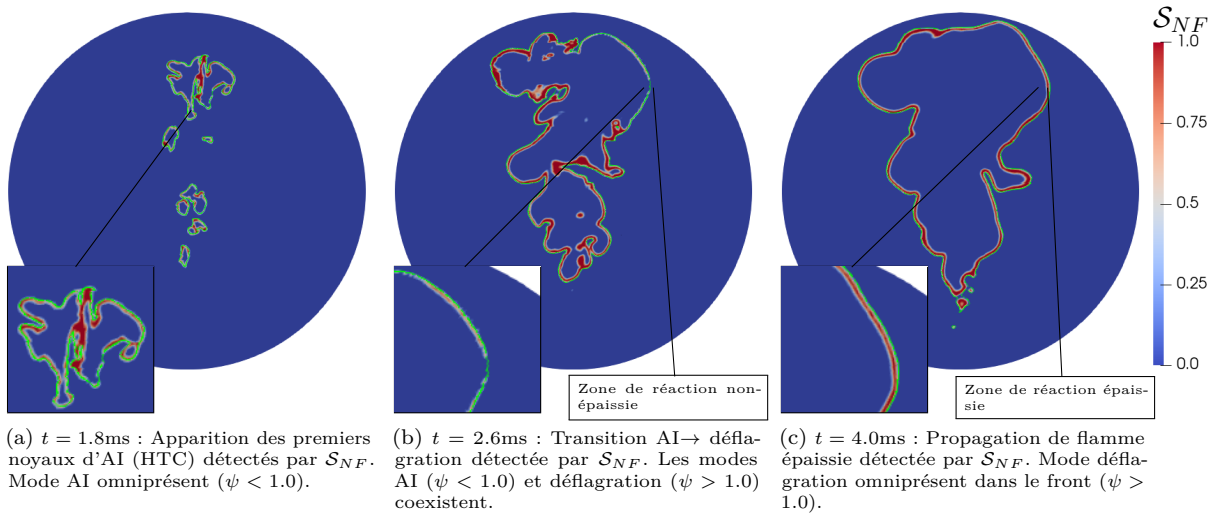


FIGURE 6.24 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} à différents instants clés. L'ensemble de zones de réaction discriminées par l'iso-valeur $c = 0.5$ est détecté par \mathcal{S}_{NF} durant la transition AI→déflagration, et ce indépendamment du mode AI/déflagration et du paramètre de sensibilité β associé.

6.5.3.3 Comportement du senseur final \hat{S}

Pour rappel, dans TFM-M2_{destr}, le senseur de flamme final \hat{S} et l'indicateur transporté ψ sont liés par la relation : $\hat{S} = \min(\psi, 1.0)$. De même, le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} et le senseur final \hat{S} sont découplés (section 5.5.5).

Les premiers noyaux d'AI (HTC) détectés par \mathcal{S}_{NF} activent le terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{flamme}$ lorsque $c > 0.5$. Ce dernier est paramétré de façon à relaxer ψ vers 1.0 sur une durée comparable à \mathcal{T}_{flamme} , de l'ordre de 1.0ms dans les conditions thermodynamiques présentes. L'apparition des premiers noyaux d'AI Fig.6.26a s'accompagne donc de valeurs modérées telles que $\hat{S} \approx 0.1$. La propagation du front s'accompagne d'un accroissement des valeurs de \hat{S} permettant la transition vers le mode déflagration ($\psi > 1.0$) Fig.6.26b. Cette transition s'étend à l'ensemble du jet essentiellement entre $t = 1.8$ ms et $t = 3.3$ ms. Cette transition s'étend progressivement à l'ensemble du front réactif sur environ 1.5ms, pour des valeurs $\mathcal{T}_{flamme} \approx 1.0$ ms. Les temps de transition vers le mode déflagration sont donc comparables à ceux escomptés, ce qui tend à valider le conditionnement de $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{flamme}$ rencontré dans TFM-M2_{destr}. Certaines régions présentent une transition plus tardive, encadrés Fig.6.26b.

Ainsi, le conditionnement de $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{flamme}$ permet de retarder l'activation du mode déflagration d'une durée comparable à \mathcal{T}_{flamme} , elle-même comparable aux temps caractéristiques de transitions AI→déflagration τ_{trans} observés dans l'étude fondamentale 1D du chapitre 4 (section 4.2.6.5). Par ailleurs, les régions en mode déflagration Fig.6.26b et 6.26c affichent un étalement du senseur \hat{S} permettant d'englober l'ensemble du front (zones de préchauffage+réaction), et de reproduire les caractéristiques de TFM-M0.

Toutefois, un élément tranchant significativement avec M0 apparaît : Une quantité de \hat{S} apparaît dans les GB, encadrés Fig.6.26a et 6.26b. En effet, TFM-M2_{destr} implique une ré-écriture du terme de destruction telle que $\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB} = 0$ en mode AI (section 5.5.5). De fait, la quantité de \hat{S} créée au passage du front (via $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{flamme}$) subsiste dans les régions GB et entraîne l'application d'un facteur d'épaississement indésirable dans le sillage du front. Cependant, ce dernier est en pratique faible devant \mathcal{F}_{target} , voir Fig.6.29, et est progressivement éliminé par l'intermédiaire de $\psi_{burntgas}$ (terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB}$ piloté par la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$).

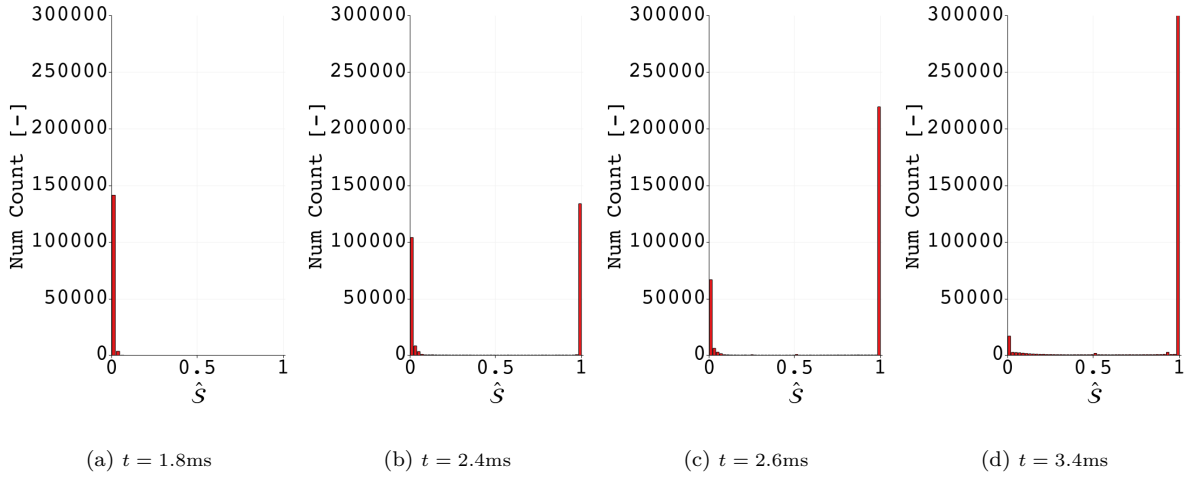


FIGURE 6.25 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta x = 200\mu\text{m}$: Évolution temporelle de la distribution de \hat{S} dans le front de flamme. Un conditionnement tel que $0.1 < c < 0.9$ permettant d'isoler les éléments de surface de flamme/front d'AI est appliqué, afin d'évaluer la proportion brûlant en mode AI ($\hat{S} < 1.0$) et en mode déflagration ($\hat{S} = 1.0$). Les premiers instants s'accompagnent de valeurs très faibles, confirmant l'inopérance du facteur d'épaississement durant l'AI. La transition AI→déflagration s'accompagne d'un accroissement de \hat{S} (distribution centrée autour de $\hat{S} = 1.0$). Le mode déflagration s'applique à toute la surface de flamme à $t = 3.4$ ms.

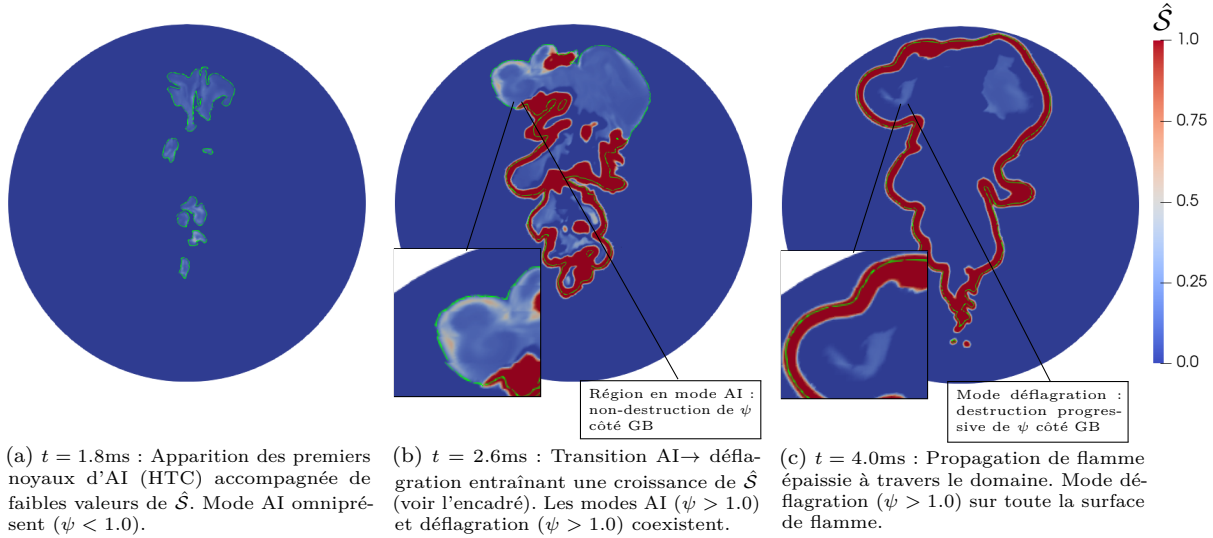


FIGURE 6.26 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Senseur final \hat{S} à différents instants clés. La ligne verte représente une iso-valeur $c = 0.5$. La transition AI \rightarrow déflagration s'accompagne d'un accroissement de \hat{S} permettant l'activation du mode déflagration après un temps comparable à \mathcal{T}_{flamme} . Le fonctionnement bimodal de M2_{destr} permet la description des deux modes de combustion (AI/déflagration).

6.5.3.4 Comportement de l'indicateur de gaz brûlés $\psi_{burntgas}$

Pour rappel, la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ entraîne l'application de la condition $\beta = \beta_{deflag}$ dans le front de flamme épaissie et son sillage. Comme discuté en section 5.5.5, l'indicateur de gaz brûlés $\psi_{burntgas}$ possède un terme de création $\dot{\omega}_{\psi}^+|_{flamme}$ prenant effet lorsque le mode déflagration est actif ($\psi > 1.0$), et possède un terme de destruction côté GF, mais aucun côté GB, de façon à permettre sa diffusion "libre" dans le sillage du front. Cela à deux objectifs : (i) activer le terme de destruction $\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB}$, afin d'éviter l'application d'un facteur d'épaississement dans des zones GB éloignées du front de flamme épaissie, (ii) réduire la sensibilité \mathcal{S}_{NF} afin d'empêcher la détection de réactions de post-oxydation dans les zones GB, et d'éviter que les réactions post-flamme ne soient interprétées comme des éléments de surface de flamme.

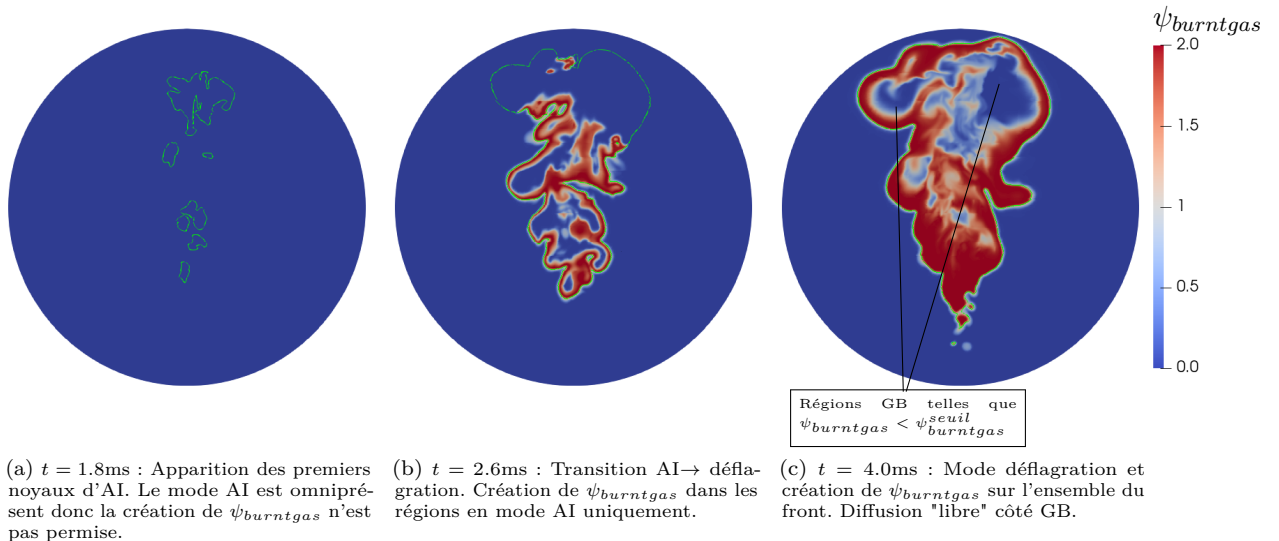


FIGURE 6.27 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Indicateur de gaz brûlés $\psi_{burntgas}$. La création et la diffusion de $\psi_{burntgas}$ "libre" côté GB accompagne la transition vers le mode déflagration, et "marque" l'ensemble des gaz brûlés. La ligne verte représente une iso-valeur $c = 0.5$.

Ainsi, aux premiers instants, le mode AI actif dans tout le domaine ne permet pas la création de $\psi_{burntgas}$ Fig.6.27a. Puis, l'activation progressive du mode déflagration génère un dépôt de $\psi_{burntgas}$ dans les régions concer-

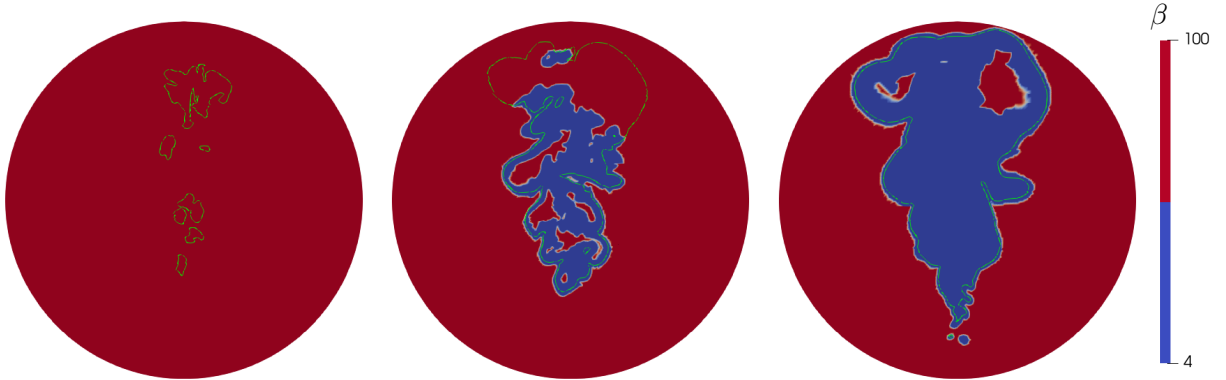
nées Fig.6.27b. La non-destruction de $\psi_{burntgas}$ côté GB entraîne une diffusion "libre" dans le sillage du front de flamme épaissie, comme attendu. Celle-ci se manifeste par un recouvrement progressif de l'ensemble des gaz brûlés Fig.6.27c permettant d'étendre la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ et de détruire ψ côté GB, Fig.6.26b et 6.26c.

Il est toutefois souligné que la destruction de ψ via $\dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB}$ est conditionnée par la diffusion de $\psi_{burntgas}$, phénomène plutôt lent. De fait, certaines poches de gaz brûlés ne sont marquées comme telles ($\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$) qu'après des durées de l'ordre de 1.0ms Fig.6.27c retardant d'autant la destruction de la quantité de ψ résiduelle, et du facteur d'épaississement indésirable qu'elle entraîne. Cette caractéristique du modèle semble donc discutable. Toutefois, celle-ci affecte le sillage du front de réaction mettant en jeu des dégagement d'énergie faibles, et n'influence a priori pas la dynamique d'ensemble du calcul. De plus, la diffusion de $\psi_{burntgas}$ permet d'étendre la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ à l'ensemble des régions GB au cours de la simulation. Le problème d'épaississement dans le sillage du front est donc transitoire.

6.5.3.5 Comportement du paramètre de sensibilité β

Pour rappel, en conséquence directe du fonctionnement bi-modal de TFM-M2_{destr}, le paramètre β prend la valeur β_{AI} dans les régions en mode AI ($\psi < 1.0$ et $\psi_{burntgas} < \psi_{burntgas}^{seuil}$), et β_{defla} dans les régions en mode déflagration ($\psi > 1.0$ ou $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$), voir section 5.5.5.

L'omniprésence du mode AI aux premiers instants Fig.6.28a implique alors $\beta = \beta_{AI}$ à l'ensemble du domaine. La transition vers le mode déflagration valide la condition $\psi > 1.0$ et entraîne le dépôt et la diffusion "libre" de $\psi_{burntgas}$ dans les gaz brûlés permettant de valider la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ dans le sillage du front Fig.6.28b. Aussi, le front de flamme épaissi ainsi que son sillage proche respectent systématiquement $\beta = \beta_{defla}$. Toutefois, la condition $\beta = \beta_{AI}$ persiste dans certaines poches de gaz brûlés Fig.6.28c en raison du temps de diffusion de $\psi_{burntgas}$ côté GB. Le mode AI "résiduel" s'exerçant dans ces régions est, une fois encore, transitoire puisque la diffusion de $\psi_{burntgas}$ étend progressivement la condition $\psi_{burntgas} > \psi_{burntgas}^{seuil}$ à l'ensemble des gaz brûlés.



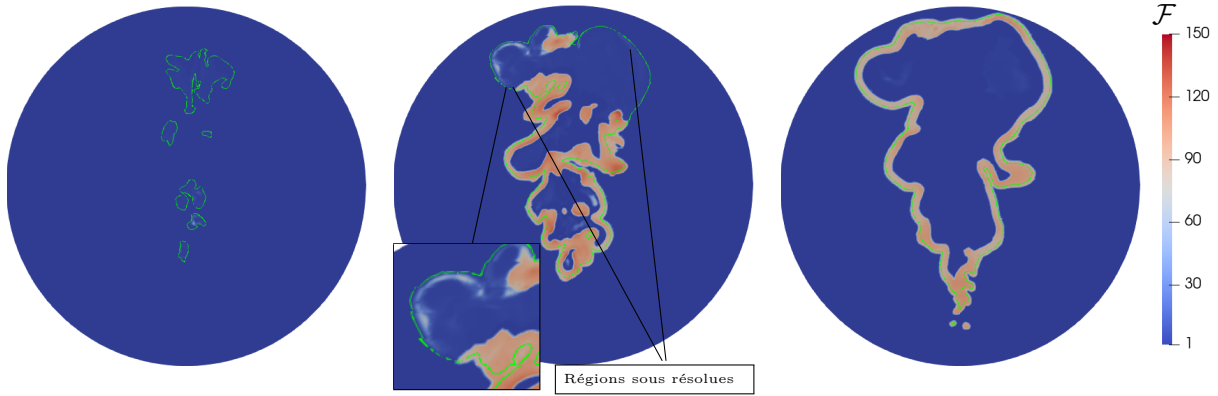
(a) $t = 1.8\text{ms}$: Apparition des premiers noyaux d'AI (HTC). Le mode AI omniprésent et $\beta = 4.0$ dans tout le domaine. (b) $t = 2.6\text{ms}$: Transition AI \rightarrow déflagration. Coexistence des modes AI $\beta = 100.0$ et déflagration $\beta = 4.0$. (c) $t = 4.0\text{ms}$: Mode déflagration ($\beta = 4.0$) sur l'ensemble du front. Diffusion "libre" de $\psi_{burntgas}$ dans le sillage du front étendant $\beta = 4.0$ à côté GB.

FIGURE 6.28 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Paramètre de sensibilité β . La valeur de β reposant sur les conditions $\psi < 1.0$ et $\psi_{burntgas} < \psi_{burntgas}^{seuil}$ permet d'appliquer le paramètre $\beta = \beta_{AI}$ à l'ensemble du domaine en mode AI, puis d'étendre le paramètre $\beta = \beta_{defla}$ à l'ensemble du front de flamme et des gaz brûlés lors de la transition vers le mode déflagration.

6.5.3.6 Comportement du facteur d'épaississement \mathcal{F}

Pour rappel, le facteur d'épaississement est piloté par la relation $\mathcal{F} = 1 + (\mathcal{F}_{target} - 1)\hat{S}$. Le facteur d'épaississement croît donc avec la même progressivité que \hat{S} . En conséquence, l'apparition des premiers noyaux d'AI s'accompagne de facteurs d'épaississement très faibles ($\mathcal{F} \approx 1.0 - 5.0$) n'induisant pas de retard significatif de

l'allumage Fig.6.29a. La transition vers le mode déflagration s'accompagne d'une relaxation du facteur d'épaississement vers sa valeur nominale \mathcal{F}_{target} Fig.6.29b. L'épaississement nominal couvre l'ensemble de la surface de flamme autour de $t = 3.3\text{ms}$ (non-montré ici) et assure la résolution du front de flamme pré-mélangée sur 5 points Fig.6.29c. Toutefois, tout comme en configurations 1D (section 5.5.5), le paramétrage des termes source permettant la relaxation de ψ vers 1.0 sur des durées proches de \mathcal{T}_{flamme} peut dans certaines conditions s'avérer approximatif : certaines régions présentent une transition vers le mode déflagration tardive, encadré Fig.6.29b, se traduisant par la propagation d'un front temporairement sous-résolu.



(a) $t = 1.8\text{ms}$: Apparition des premiers noyaux d'AI (HTC). Mode AI omniprésent et $\mathcal{F} \ll \mathcal{F}_{target}$. (b) $t = 2.6\text{ms}$: Transition AI → déflagration. Mode déflagration : $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{target}$. Mode AI : $\mathcal{F} < \mathcal{F}_{target}$ (encadré). (c) $t = 4.0\text{ms}$: Mode déflagration sur l'ensemble du front : $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{target}$.

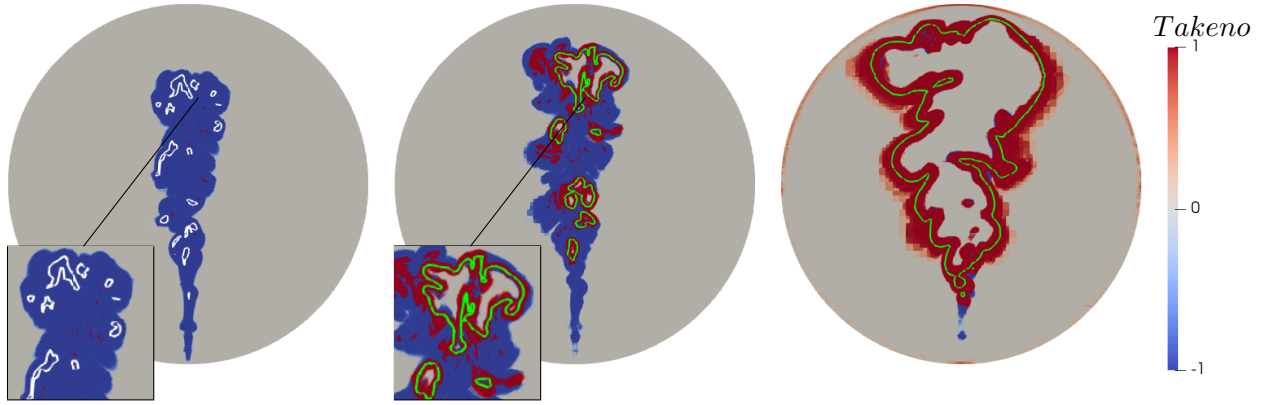
FIGURE 6.29 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Facteur d'épaississement \mathcal{F} pour différents instants clefs. La transition AI → déflagration est marquée par une croissance de $\mathcal{F} = 1$ vers $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{target}$ sur une durée proportionnelle à \mathcal{T}_{flamme} . Toutefois, certaines régions affichent une transition tardive (encadré Fig.6.29b.) induisant une propagation de flamme sous-résolue. L'épaississement nominal est tel que $\mathcal{F}_{target}^{st} = 120$ et $\mathcal{F}_{target}^{CH_4} = 90$.

6.5.3.7 Transition AI → déflagration analysée par l'indice de Takeno

L'indice de flamme proposé par Yamashita et al. [126], communément appelé "indice de Takeno" est régulièrement utilisé pour discriminer les structures de flammes de pré-mélange (indice positif) et de diffusion (indice négatif). Appliqué à un mélange bi-carburant, il est formulé comme Eq.(6.25) :

$$Takeno = \frac{\nabla(Y_{CH_4} + Y_{C_{12}H_{26}}) \cdot \nabla Y_{O_2}}{|\nabla(Y_{CH_4} + Y_{C_{12}H_{26}})| \cdot |\nabla Y_{O_2}|} \quad (6.25)$$

Les premiers noyaux d'AI de flamme froide (LTC) Fig.6.30a s'accompagnent d'indices négatifs indiquant une structure de flamme diffusive. Les premiers noyaux d'AI de flamme chaude (HTC) initiant la transition AI → déflagration s'accompagnent d'indices positifs et négatifs Fig.6.30b. Les indices positifs apparaissent au voisinage proche du front et les indices négatifs au voisinage plus lointain, indiquant des gradients de mélange en périphérie du front. Ces éléments suggèrent alors la propagation d'un front pré-mélangé en milieu stratifié. Aux instants plus avancés Fig.6.30c, seuls des indices positifs sont rencontrés, suggérant un régime de déflagration en milieu homogène. Toutefois, l'indice de Takeno est incapable de distinguer les régimes d'AI et de déflagration. En effet, comme discuté dans l'étude fondamentale du chapitre 4, un front d'AI peut présenter une structure similaire à une flamme pré-mélangée sans pour autant en épouser les caractéristiques essentielles (profil, épaisseur, vitesse de déplacement). Un indice positif constitue donc une condition nécessaire, mais non-suffisante pour caractériser un régime de déflagration. Toutefois, le cas présent met en lumière le passage d'indices négatifs à positifs révélant un changement de structure progressif accompagnant la transition AI → déflagration.



(a) $t = 1.2\text{ms}$: AI de flamme froide. Structure de front (LTC) essentiellement diffusive.

(b) $t = 1.8\text{ms}$: AI de flamme chaude (HTC). Structure de front (HTC) essentiellement pré-mélangée. Structure diffusive dans les régions LTC partiellement brûlées.

(c) $t = 3.0\text{ms}$: Régime de déflagration atteint. Structure de flamme pré-mélangée dominante.

FIGURE 6.30 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Indice de Takeno pour différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). La structure s'apparente premièrement à celle d'une flamme de diffusion, puis à celle d'une flamme pré-mélangée.

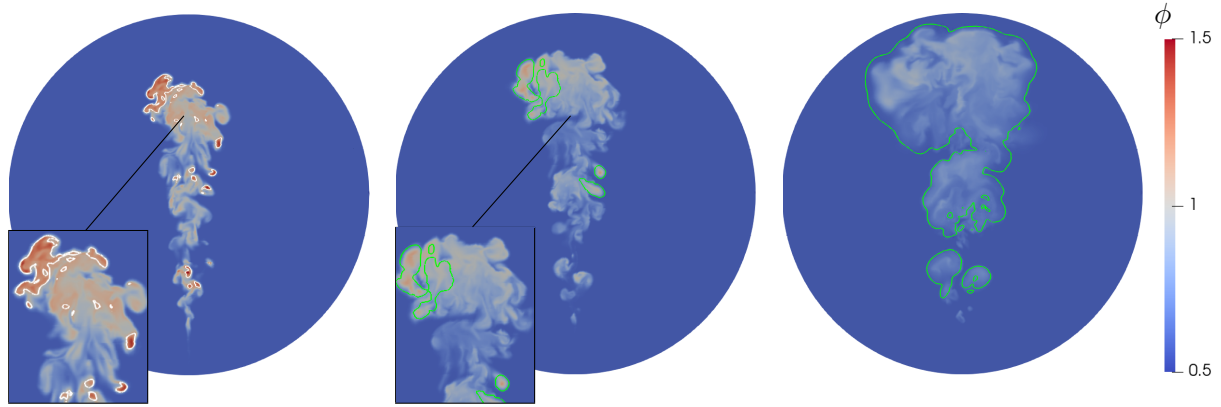
6.5.3.8 Influence du maillage sur la transition AI→déflagration

Une brève étude de sensibilité au maillage montre une dynamique globale similaire entre $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 150\mu\text{m}$, voir Fig.6.23 et 6.31. En effet, l'AI de flamme froide (LTC) Fig.6.31a et chaude (HTC) Fig.6.31b, apparaissent respectivement peu avant $t = 1.2\text{ms}$ et $t = 1.8\text{ms}$ et à des richesses $\phi = 1.5$ et $\phi = 1.3$, correspondant à la richesse maximale locale ϕ_{max} aux instants considérés. Identiquement, l'AI (HTC) apparaît principalement au bout du jet, et plusieurs noyaux secondaires se forment dans son sillage. De plus, la pénétration du jet est très similaire pour $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 150\mu\text{m}$. Cela suggère, tout comme pour les calculs non-réactifs Fig.6.7b, une faible sensibilité à la résolution.

La modélisation de la transition AI→déflagration montre également un comportement similaire aux deux niveaux de résolution étudiés. Alors que la transition s'effectue globalement entre $t = 1.8\text{ms}$ et $t = 3.3\text{ms}$ pour $\Delta_x = 200\mu\text{m}$, celle-ci s'effectue entre $t = 1.8\text{ms}$ et $t = 2.8\text{ms}$ pour $\Delta_x = 150\mu\text{m}$. Un maillage plus fin implique des facteurs \mathcal{F}_{target} et temps de flamme épaissies \mathcal{T}_{flamme} inférieurs, et par conséquent une transition vers le mode déflagration plus précoce. Le raccourcissement de la durée de transition est proportionnel à celui des temps de flammes, ce qui suggère un comportement cohérent du modèle TFM-M2_{destr}.

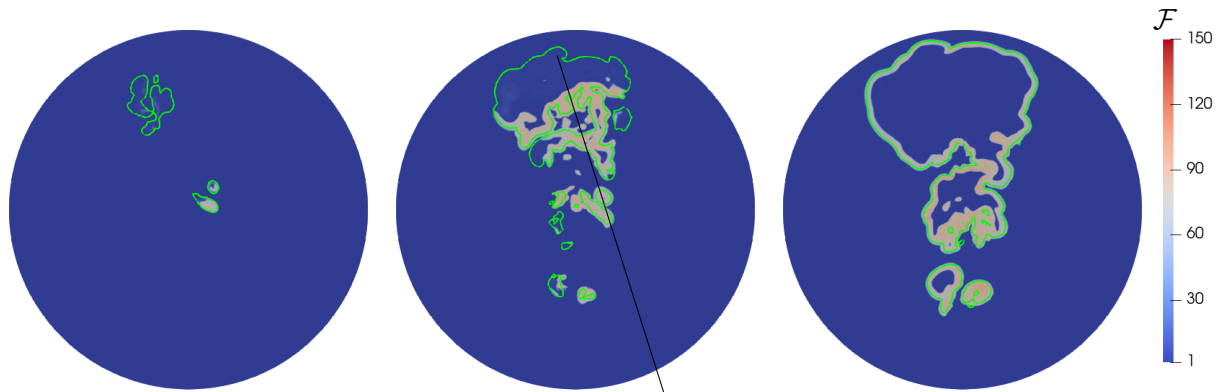
Le dégagement de chaleur du calcul $\Delta_x = 150\mu\text{m}$ affiche un pic d'AI (HTC) centré autour de $t = 2.0\text{ms}$ identiquement au calcul $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ Fig.6.33. Toutefois l'amplitude du pic est environ 30% inférieure à celle du calcul au maillage $\Delta_x = 200\mu\text{m}$. Cet effet pourrait être imputé à une inhibition plus prononcée de l'AI pour le maillage plus fin en raison du temps de relaxation plus court vers le mode déflagration. Cependant, le temps de relaxation n'est pas drastiquement raccourci par rapport à $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ (environ 30% plus court), et l'étude paramétrique sur $\mathcal{R}_{flametime}$ (section 5.5.6.3) suggère qu'un raccourcissement similaire n'engendre pas de retard à l'AI significatif. Les temps de relaxation plus faibles vers le mode déflagration ne sont donc a priori pas responsables de la différence d'amplitude du pic d'AI (HTC). Celle-ci est plutôt attribuée à des effets purement aérodynamiques, et d'une dispersion différente du jet.

En effet à $t = 1.8\text{ms}$, une multitude de noyaux d'AI (HTC) apparaît à travers le jet pour $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ Fig.6.23b, tandis que seuls deux noyaux distincts apparaissent pour $\Delta_x = 150\mu\text{m}$ Fig.6.31b. La dispersion du jet pour $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ semble générer un plus grand nombre de noyaux d'AI (HTC), et donc une plus grande surface de réaction, ce qui favorise un dégagement de chaleur supérieur.



(a) $t = 1.2\text{ms}$: AI de flamme froide (LTC) initiée autour de $\phi = 1.5$. (b) $t = 1.8\text{ms}$: AI de flamme chaude (HTC) initiée autour de $\phi = 1.3$. (c) $t = 3.0\text{ms}$: Propagation front de flamme côté méthane.

FIGURE 6.31 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 150\mu\text{m}$: Champs de richesse à différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Une forte diminution de la richesse maximale locale suit la fin de l'injection.



(a) $t = 1.8\text{ms}$: Début AI de flamme chaude (HTC). Les valeurs de ψ faibles induisent un épaississement négligeable. (b) $t = 2.2\text{ms}$: La création de ψ induit un épaississement fort dans les régions en mode déflagration. La propagation du front est sous-résolue dans certaines régions. (c) $t = 3.0\text{ms}$: Début AI de flamme chaude (HTC). Les valeurs de ψ faibles induisent un épaississement négligeable.

FIGURE 6.32 – Calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 150\mu\text{m}$: Facteur d'épaississement dynamique \mathcal{F} à différents instants clés. L'épaississement nominal est tel que $\mathcal{F}_{target}^{st} = 90$ et $\mathcal{F}_{target}^{CH_4} = 65$ respectivement à la stœchiométrie, et dans le pré-mélange air/ CH_4 .

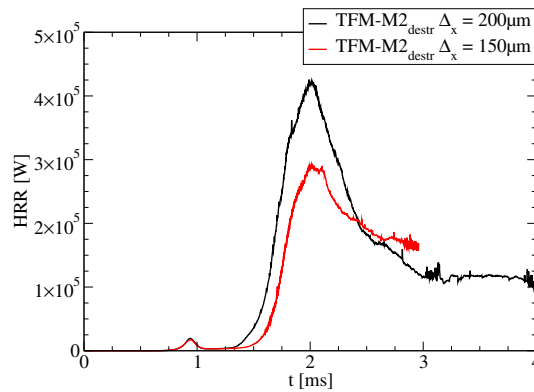


FIGURE 6.33 – Dégagement de chaleur du domaine pour un maillage $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 150\mu\text{m}$. Le pic d'AI de flamme froide ($t = 1.0\text{ms}$) est indépendant de la résolution, en chronologie et en intensité. Le pic d'AI de flamme chaude ($t = 2.0\text{ms}$) est temporellement indépendant de la résolution, mais présente une intensité supérieure pour $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ attribuée à des effets de dispersion et d'aérodynamique.

6.5.4 Comparaison des calculs *no-model*, TFM-M0 et TFM-M2_{destr}

La comparaison des taux de dégagement de chaleur des calculs *no-model*, TFM-M0 et TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ Fig.6.34, illustre l'impact de la modélisation du facteur d'épaississement sur la transition AI→déflagration. Ainsi, ces trois calculs impliquent un dégagement de chaleur de flamme froide (LTC) identique autour de $t = 1.0\text{ms}$. L'AI de flamme chaude, centrée autour de $t = 2.0\text{ms}$ pour le calcul *no-model* (référence pour l'AI), est fortement retardée pour le calcul TFM-M0. Ainsi, le modèle TFM-M0 modifie fortement la dynamique d'allumage : le pic d'AI (HTC) est entièrement éliminé Fig.6.34, et l'arrivée des premières poches de GB survient autour de $t = 2.4\text{ms}$ Fig.6.17, contre $t = 1.8\text{ms}$ pour la calcul *no-model* Fig.6.11, équivalent à un allongement d'un facteur 1.5 des délais d'AI.

Le calcul TFM-M2_{destr} affiche quant à lui une forte proximité avec le calcul *no-model* durant l'AI (HTC) Fig.6.34, confirmant l'absence d'interaction significative entre les noyaux d'AI et le facteur d'épaississement. L'application du facteur d'épaississement se traduit essentiellement après $t = 2.0\text{ms}$, par une atténuation du dégagement de chaleur par rapport au calcul *no-model*. La sous-solution du front (*no-model*) se traduit dans les conditions présentes par une surestimation du dégagement de chaleur (propagation trop rapide du front de réaction). Cela souligne l'importance primordiale d'une résolution suffisante pour représenter le régime de déflagration, et l'intérêt du fonctionnement bi-modal (AI/déflagration) de TFM-M2_{destr} permettant de traiter les deux régimes de façon indépendante.

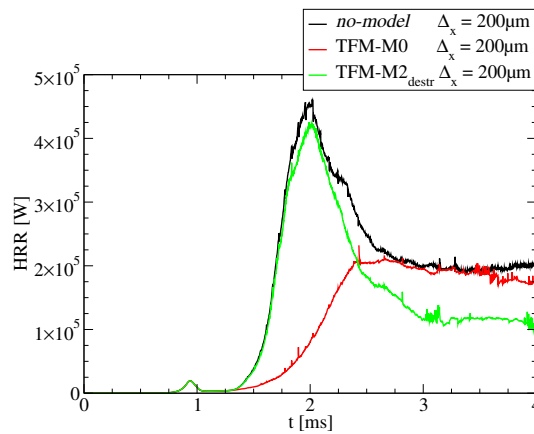


FIGURE 6.34 – Influence du facteur d'épaississement sur les régimes d'AI et de déflagration sur un maillage $\Delta_x = 200\mu\text{m}$. Le calcul TFM-M0 retarde et atténue fortement le pic d'AI (HTC), tandis que le calcul *no-model* surestime le dégagement de chaleur du régime de déflagration. Le calcul TFM-M2_{destr} reproduit le pic d'AI de référence (*no-model*) tout en assurant une résolution suffisante de la propagation de flamme.

6.5.5 Calcul TKI-ECFM, capacité à représenter la transition AI→déflagration

6.5.5.1 Comportement global

L'apparition des premiers points d'AI de flamme froide (LTC) survient autour de la richesse maximale $\phi_{max} = 1.5$ autour de $t = 1.0\text{ms}$ Fig.6.36a, similairement à TFM-M2_{destr} Fig.6.23a. Toutefois l'AI de flamme chaude (HTC) survient de façon séquentielle, premièrement en bout de jet autour de $t = 1.8\text{ms}$ et $\phi_{max} = 1.3$ Fig.6.36b, puis dans le sillage du jet autour de $t = 2.2\text{ms}$ et $\phi = 1.0$ Fig.6.36c, et tend à créer deux régions d'allumage distinctes. Ce comportement tranche avec celui du calcul à TFM-M2_{destr} impliquant l'apparition de points d'AI de façon plus simultanée et homogène à travers le jet 6.23b.

Le calcul TKI-ECFM présente ainsi un allumage plus disparate, et plus hétérogène en richesse, que le calcul TFM-M2_{destr}. Cette AI de flamme chaude (HTC) "en deux temps" se traduit par un triple pic de dégagement de chaleur du modèle TKI (1 pic LTC + 2 pics HTC) et un double pic de dégagement de chaleur du modèle ECFM en raison de la surface de flamme initiée par les deux "vagues" d'AI (HTC) Fig.6.39.

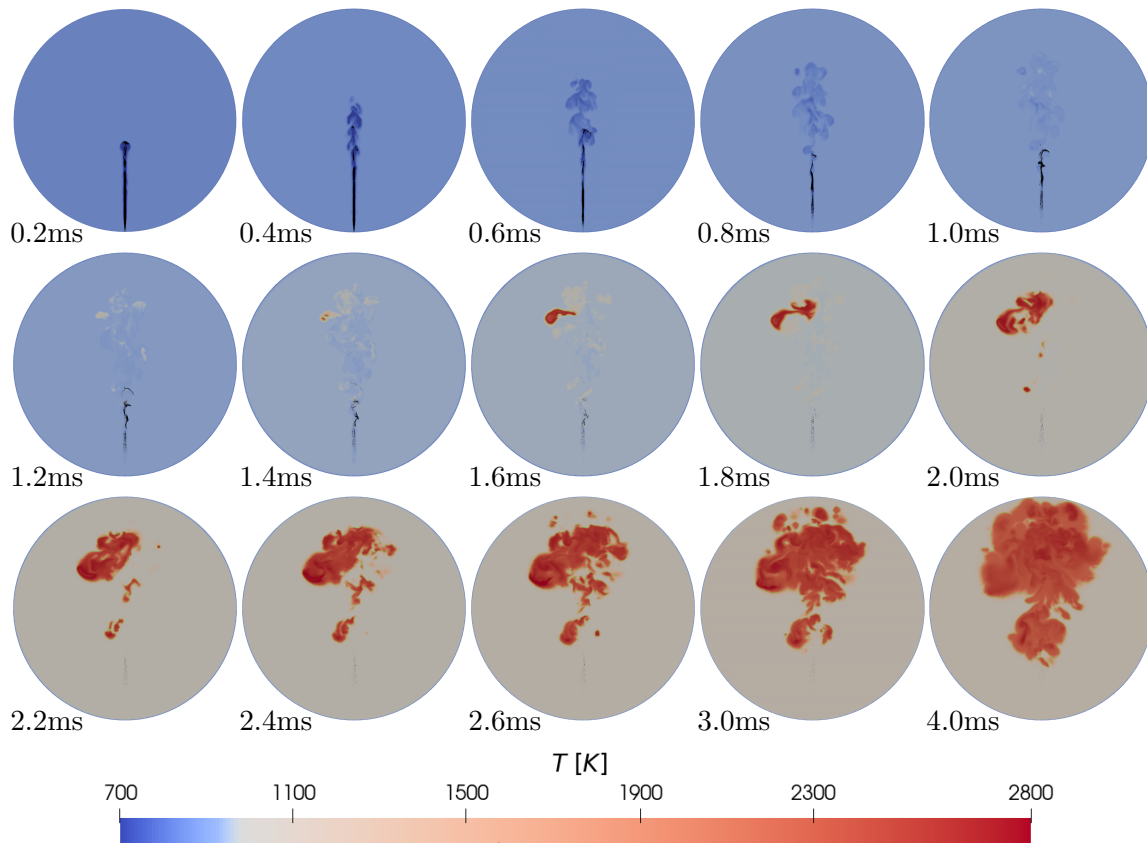


FIGURE 6.35 – Calcul TKI-ECFM - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Évolution temporelle du champ de température pour TKI-ECFM. Les premiers points d'AI de flamme froide apparaissent autour de $t = 1.0\text{ms}$. L'AI de flamme chaude (HTC) survient un premier temps autour de $t = 1.8\text{ms}$, puis autour de $t = 2.2\text{ms}$ dans le sillage du jet.

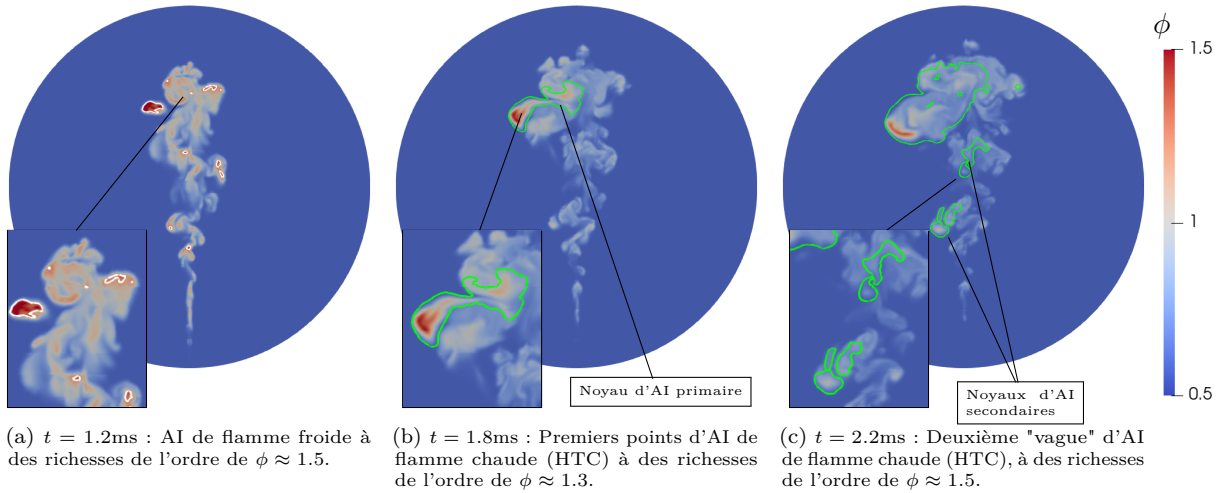


FIGURE 6.36 – Calcul TKI-ECFM - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Champs de richesse à différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Une forte diminution de la richesse maximale locale suit la fin de l'injection.

6.5.5.2 Transition de TKI vers ECFM

Les noyaux d'AI de flamme froide impliquant des avancements faibles ($c \approx 0.1$) sont assurés par TKI Fig.6.37a. L'AI de flamme chaude (HTC) est assurée par TKI mais entraîne un dépôt de surface de flamme piloté par la condition $\tilde{c}_{AI}^{seuil} > 0.5$. L'AI (HTC) s'accompagne donc du fonctionnement simultané de TKI et ECFM souligné par les valeurs d'avancement \tilde{c}_{AI} et \tilde{c}_Σ Fig.6.37b et 6.38b. La transition AI→déflagration s'accompagne toutefois d'une prédominance rapide (environ 0.1ms) du dégagement de chaleur de ECFM, une fois l'AI (HTC) survenue Fig.6.39.

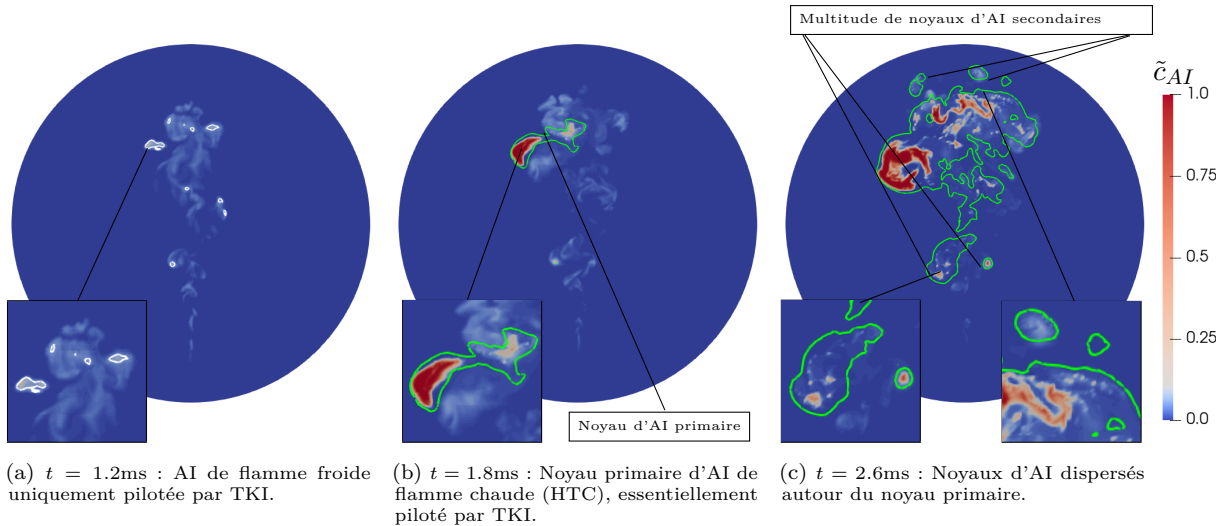
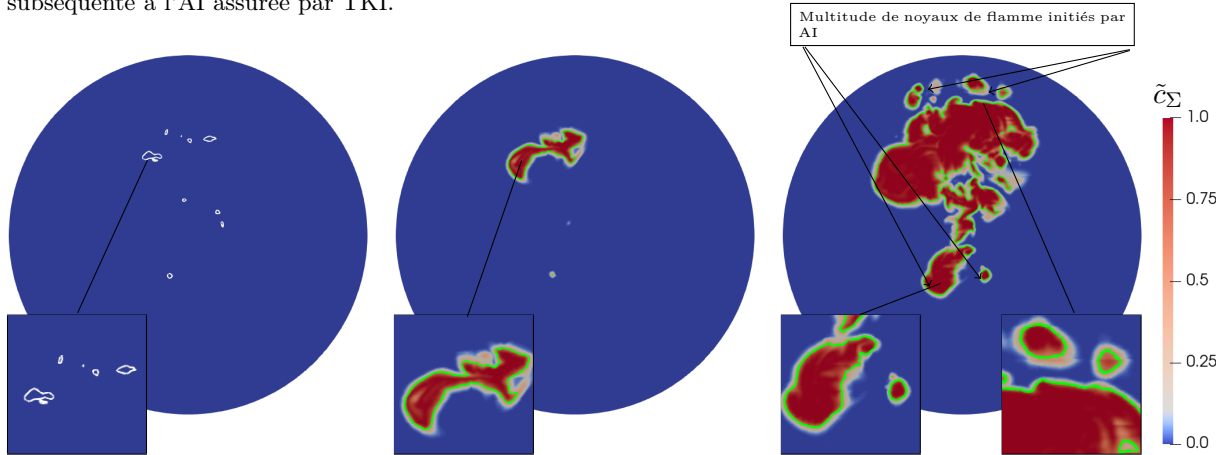


FIGURE 6.37 – Calcul TKI-ECFM - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Champs d'avancement d'AI \tilde{c}_{AI} à différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Un noyau d'AI central apparaît en bout de jet, tandis que plusieurs noyaux secondaires se développent en périphérie du premier.

Ceci suggère que TKI n'opère qu'aux premiers instants de la transition AI→déflagration, et que les instants ultérieurs relatifs à l'établissement progressif d'un profil de flamme pré-mélangée (section 4.2.6.5) sont essentiellement traités par ECFM, représentatif d'un régime de déflagration établi. Bien que des calculs 1D (section 5.3.2.2) montrent une propagation d'AI par inflammations successives, le modèle TKI n'est pas conçu pour assurer un régime propagatif. La propagation d'un front de réaction hybride AI/déflagration faisant intervenir conjointement TKI et ECFM de façon prolongée est donc peu permise, en raison de la faible propension de TKI à représenter

un phénomène propagatif lorsque la réactivité est insuffisante. Cela favorise donc la dominance rapide de ECFM subséquente à l'AI assurée par TKI.



(a) $t = 1.2\text{ms}$: AI flamme froide ne générant aucun dépôt de surface de flamme ($\tilde{c}_\Sigma = 0$). (b) $t = 1.8\text{ms}$: Première "vague" d'AI de flamme chaude entraînant un dépôt de surface de flamme visible par \tilde{c}_Σ . (c) $t = 2.6\text{ms}$: Noyaux de surface de flammes issus de la seconde "vague" d'AI, dispersée autour du jet.

FIGURE 6.38 – Calcul TKI-ECFM - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: Champs d'avancement de surface de flamme \tilde{c}_Σ . Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Les multiples points d'AI secondaires donnent naissance à une propagation de flamme dispersée à travers la chambre.

Comparativement à TFM-M2_{destr} affichant une transition vers le mode déflagration sur une durée d'environ 1.0ms, la transition entre TKI et ECFM apparaît alors beaucoup plus abrupte avec une dominance de ECFM environ 0.1ms après l'AI, Fig.6.39. Elle semble également moins représentative de la physique "réelle" qui implique une certaine progressivité dans l'établissement d'un régime de déflagration. Toutefois, la transition AI→déflagration s'accompagne de taux de réaction comparables à ceux d'une flamme pré-mélangée (sections 4.1.7 et 4.2.6). Les comportements limites (AI/déflagration) étant correctement représentés, la non-prise en compte de la progressivité accompagnant la transition ne semble donc pas problématique d'un point de vue de la modélisation.

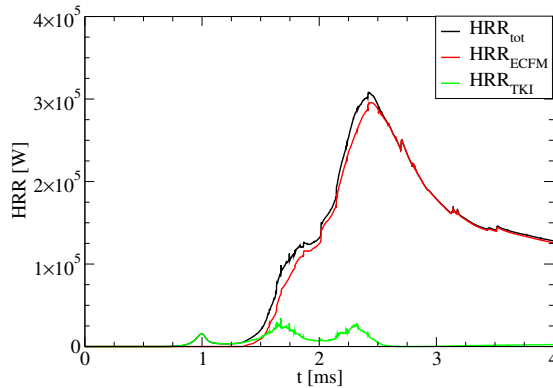


FIGURE 6.39 – Calcul TKI-ECFM - $200\mu\text{m}$: Comparaison des contributions de TKI et ECFM sur le dégagement de chaleur intégré sur tout le domaine (3 pics de TKI). Le pic d'AI de flamme froide ($t = 1.0\text{ms}$) est issu de TKI. Les pics d'AI de flamme chaude ($t = 1.8\text{ms}$ et $t = 2.2\text{ms}$) sont aux premiers instants issus de TKI, mais ECFM représente rapidement l'essentiel du dégagement de chaleur, traduisant une transition rapide spontanée vers un régime de déflagration.

6.5.5.3 Influence du maillage

L'allure du jet ainsi que les délais d'AI de flamme froide (LTC) ne sont pas significativement affectés par ce changement de résolution Fig.6.36 et 6.40. Toutefois, l'AI de flamme chaude (HTC) montre un comportement différent entre les deux niveaux de résolution. Alors que le calcul $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ affiche deux pics d'AI (HTC) à $t = 1.6\text{ms}$ et $t = 2.2\text{ms}$ Fig.6.39, le calcul $\Delta_x = 150\mu\text{m}$, affiche un unique pic d'AI (HTC) à $t = 1.8\text{ms}$ Fig.6.43.

Ainsi, pour le calcul $\Delta_x = 150\mu\text{m}$, de multiples noyaux d'AI surviennent simultanément en bout de jet, et dans le sillage du jet à $t = 1.8\text{ms}$ et $\phi_{max} = 1.3$ Fig.6.40b. Cette différence de comportement est essentiellement attribuée à une dispersion différente du jet dans la chambre. Une distribution plus homogène pour $\Delta_x = 150\mu\text{m}$ favorise une AI simultanée, tandis qu'une distribution plus hétérogène pour $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ favorise une AI plus disparate, se déroulant en deux "vagues" d'AI (HTC) distinctes comme décrit en section 6.5.5.1.

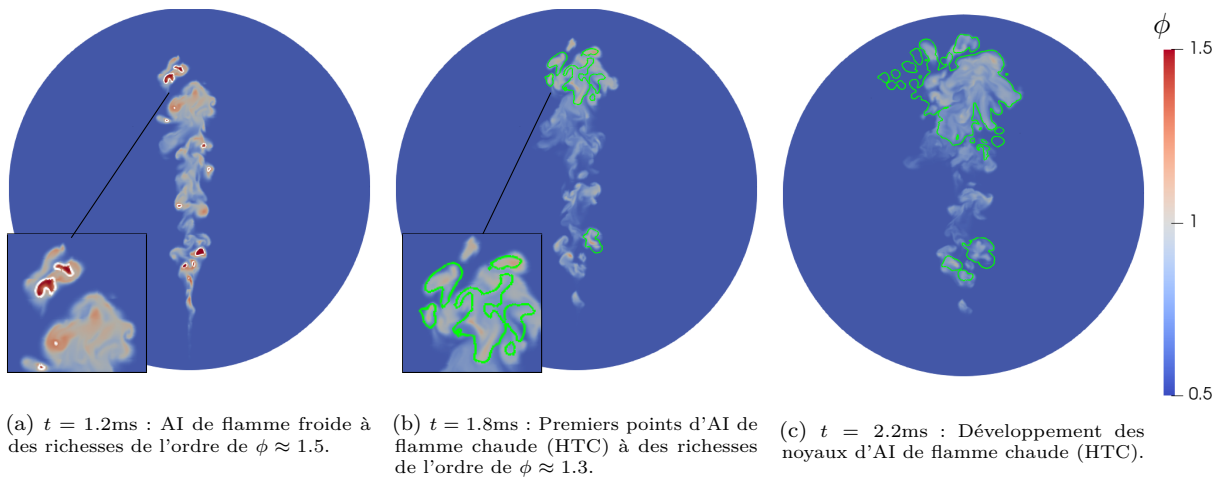


FIGURE 6.40 – Calcul TKI-ECFM - $\Delta_x = 150\mu\text{m}$: Champs de richesse à différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Une forte diminution de la richesse maximale locale suit la fin de l'injection.

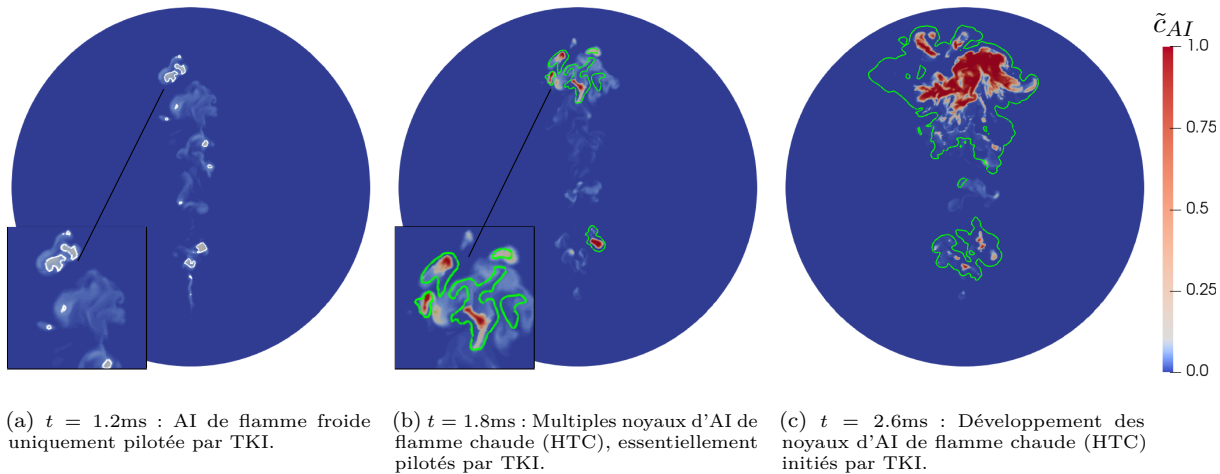
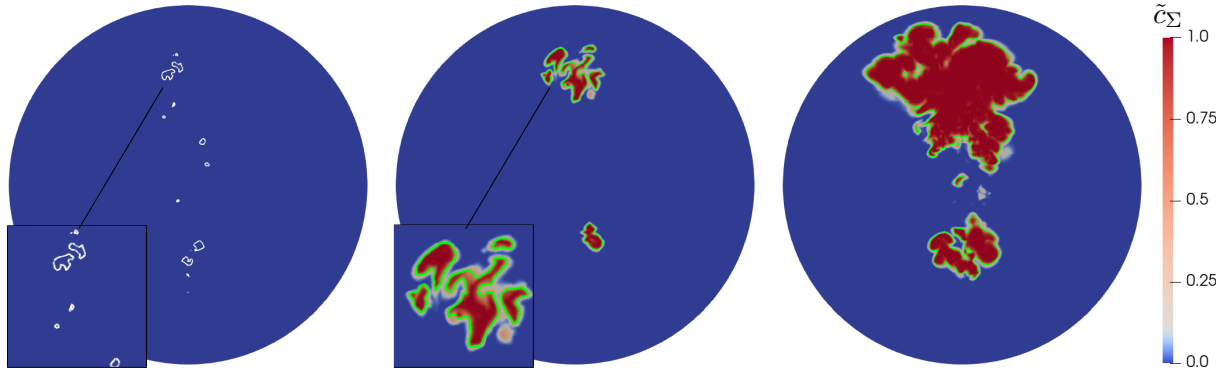


FIGURE 6.41 – Calcul TKI-ECFM - $\Delta_x = 150\mu\text{m}$: Champs d'avancement d'AI \tilde{c}_{AI} à différents instants clés. Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Deux noyaux d'AI apparaissent en bout de jet, et dans son sillage, de façon relativement simultanée.



(a) $t = 1.2\text{ms}$: AI flamme froide ne générant aucun dépôt de surface de flamme ($\tilde{c}_\Sigma = 0$). (b) $t = 1.8\text{ms}$: AI de flamme chaude (HTC) générant un dépôt de surface de flamme visible à \tilde{c}_Σ . (c) $t = 2.6\text{ms}$: Noyaux de surface de flammes issus d'une AI dispersée.

FIGURE 6.42 – Calcul TKI-ECFM - $\Delta_x = 150\mu\text{m}$: Champs d'avancement de surface de flamme \tilde{c}_Σ . Une iso-valeur $c = 0.05$ (blanc) distingue le front de chimie de flamme froide (LTC), une iso-valeur $c = 0.5$ (vert) distingue le front de chimie de flamme chaude (HTC). Les deux principaux noyaux d'AI (HTC) donnent naissance à deux noyaux de flamme dont la propagation est assurée par ECFM.

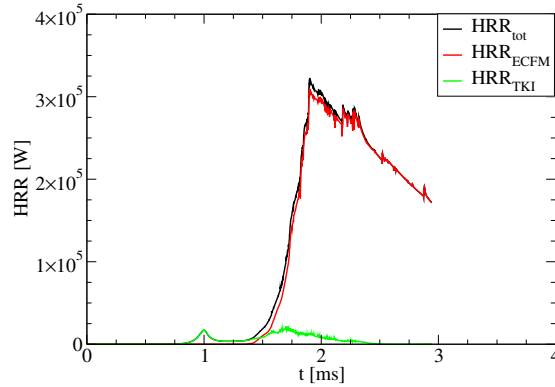


FIGURE 6.43 – Calcul TKI-ECFM - $150\mu\text{m}$: Comparaison des contributions de TKI et ECFM au dégagement de chaleur sur tout le domaine (2 pics de TKI). L'allumage par AI paraît plus homogène que pour $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ Fig.6.39 car l'AI de flamme chaude comporte un pic de TKI unique, autour de $t = 1.8\text{ms}$.

6.5.6 Discussions TKI-ECFM vs TFM-M2_{destr} en configuration *Dual-Fuel* académique

Les calculs TKI-ECFM et TFM-M2_{destr} montrent sur le cas 3D présent, des résultats globalement similaires. L'allure des jets est similaire, l'AI de flamme froide (LTC) et chaude (HTC) apparaissant à des instants proches et présentent des amplitudes comparables. Cependant, une différence marquante entre ces deux approches de modélisation se trouve dans la progressivité avec laquelle la transition AI→déflagration est représentée.

Ainsi, le modèle TKI-ECFM affiche une transition vers ECFM très rapide (de l'ordre de 0.1ms), une fois l'AI (HTC) survenue. À l'inverse, TFM-M2_{destr} ne relaxe vers le mode déflagration qu'après des durées bien supérieures, de l'ordre de 1.0ms. Cependant, les durées de transition AI→déflagration estimées à partir de l'étude fondamentale du chapitre 4 suggèrent qu'une transition vers le mode déflagration sur environ 1.0ms est cohérente avec la physique "réelle" observée dans les calculs 1D de référence. À noter toutefois que cette relaxation est paramétrable dans TFM-M2_{destr} via $\mathcal{R}_{flametime}$, et qu'une valeur inférieure (ici $\mathcal{R}_{flametime} = 0.3$) pourrait potentiellement écourter la transition vers le mode déflagration, et rapprocher le comportement de TFM-M2_{destr} de celui de TKI-ECFM en termes de temps de transition.

En outre, les faibles gradients de mélange mis en jeu dans ces calculs 3D ($|\nabla Z| \approx 50\text{m}^{-1}$) ne sont pas favorables à l'apparition d'effets de dissipation scalaire sur l'AI analogues à ceux rencontrés dans A15, section 4.2.6.3. Cela

suggère que l'AI stratifiée peut être assimilée à un ensemble de réacteurs homogènes indépendants, et satisfait alors les hypothèses de la théorie de Zeldovich [136]. Ces conditions favorisent alors la validité du modèle TKI construit sur une tabulation 0D, et la forte proximité entre les calculs TKI-ECFM et TFM-M2_{destr} est attribuée à l'absence d'effets de dissipation scalaire significatifs, du moins aux échelles résolues.

Comme discuté en section 4.2.6.3, des niveaux de stratification supérieurs pourraient favoriser l'apparition d'effets de dissipation scalaire sur la zone d'AI, et influencer sensiblement sur les délais d'AI (tout comme pour le cas A15). Similairement aux tendances relevées en section 5.3.2.1, ces effets pourraient introduire un écart significatif en termes de délais d'AI entre les calculs TFM-M2_{destr} et TKI-ECFM. L'influence des effets de dissipation scalaire n'a pas pu être étudiée dans les calculs présents, mais mériteraient d'être analysée sur des conditions thermodynamiques favorables à leur apparition, impliquant notamment des gradients de mélange plus importants dans la/les zone(s) d'AI. Cela favoriserait a priori des différences de comportement, et plus spécialement un décalage des délais d'AI, entre TKI-ECFM et TFM-M2_{destr}.

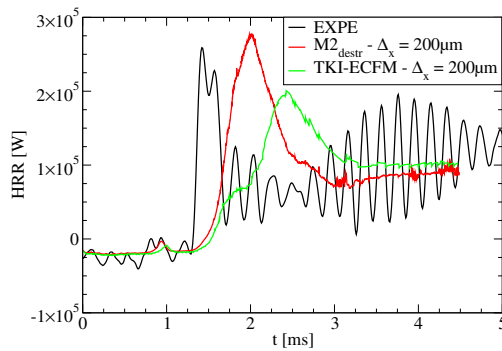
Les calculs TFM-M2_{destr} sur un maillage $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 150\mu\text{m}$ ont respectivement nécessité environ $3 \times 48\text{h}$ et $8 \times 48\text{h}$ sur 144 cœurs, soit 21000h et 56000h. Un facteur 5 entre les calculs TKI-ECFM et TFM est rencontré dans les conditions présentes, à iso-maillage. Ainsi, le temps de calcul des cas TKI-ECFM pour $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 150\mu\text{m}$ revient à 4200h et 11200h, respectivement. Ce facteur 5 est relatif au nombre d'espèces transportées, de même qu'au nombre de réactions : 54 espèces transportées et 269 taux réactions pour le schéma de Yao et al. [128] utilisé dans le calcul TFM-M2_{destr}, contre 20 espèces transportées (espèces réelles + traceurs, section 3.3.2.2) et 2 taux de réactions pour l'approche TKI-ECFM ($\dot{\omega}_c^{TKI}$ et $\dot{\omega}_c^{ECFM}$).

6.6 Comparaison numérique/expérimental

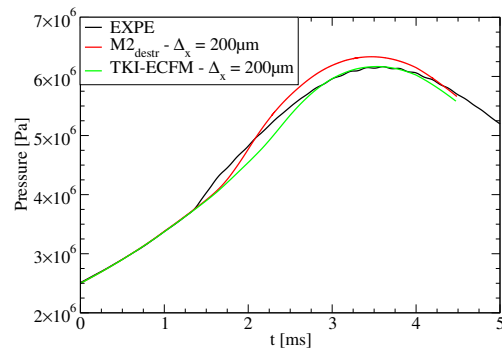
6.6.1 Grandeurs globales

Le dégagement de chaleur et la pression cylindre expérimentale sont comparés aux valeurs des simulations numériques des calculs TFM-M2_{destr} et TKI-ECFM sur des maillages $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 150\mu\text{m}$ Fig.6.44. Le dégagement de chaleur expérimental et numérique est calculé à partir de la pression et du volume Eq.(6.1) afin d'appliquer la même méthodologie aux résultats numériques et expérimentaux.

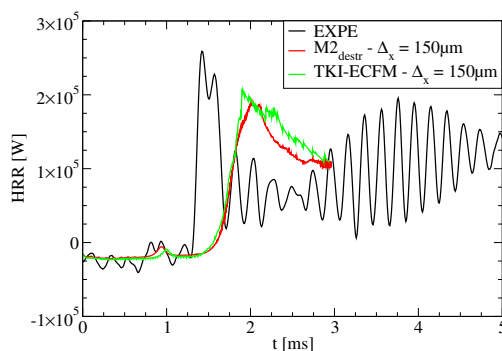
Toutefois, la pression des simulations numériques correspond à la valeur moyenne dans la chambre, tandis que la pression expérimentale correspond à la valeur en un point singulier du moteur (capteur piézoélectrique). La présence d'ondes de pressions dans la chambre expérimentale se traduit par de fortes oscillations de dégagement de chaleur, effet absent des simulations puisqu'il s'agit d'une pression moyenne, par définition insensible aux variations locales. En outre, la méthodologie appliquée ici Eq.(6.1) traduit le dégagement de chaleur "effectif" (i.e. fournissant un travail de pression), et non le dégagement de chaleur "total" (i.e. travail de pression + les flux pariétaux). Afin de simplifier l'étude, les flux pariétaux de l'expérience et des calculs numériques sont considérés égaux.



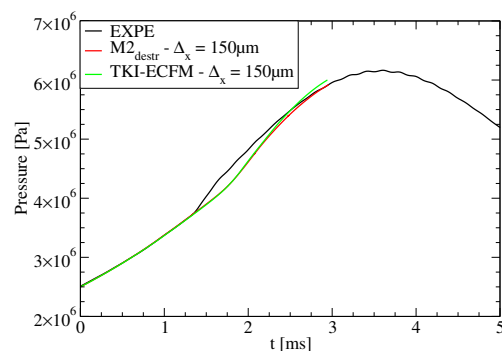
(a) Comparaison en dégagement de chaleur sur un maillage $\Delta_x = 200\mu\text{m}$.



(b) Comparaison de la pression cylindre sur un maillage $\Delta_x = 200\mu\text{m}$.



(c) Comparaison en dégagement de chaleur sur un maillage $\Delta_x = 150\mu\text{m}$.



(d) Comparaison de la pression cylindre sur un maillage $\Delta_x = 150\mu\text{m}$.

FIGURE 6.44 – Comparaison entre les mesures expérimentales et les calculs numériques utilisant les modèles TFM-M2_{destr} et TKI-ECFM. Les calculs affichent globalement un retard à l'AI (HTC) de l'ordre de 0.4ms. L'amplitude du pic d'AI (HTC) est comparable à celle de l'expérience, mais son étendue temporelle est surestimée d'un facteur proche de 2.0. La pression cylindre maximale est reproduite, bien qu'une surestimation de l'ordre de 1.5bar soit notée pour TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$.

Pour la simulation, ce dégagement de chaleur "effectif" est calculé à partir de la pression et est significativement plus faible (environ 30% d'écart) que le dégagement "total" calculé à partir des taux de réaction chimiques

Fig.6.33, 6.34, 6.39 et 6.43, en raison des pertes aux parois.

Pour l'expérience et les calculs TKI-ECFM et TFM-M2_{destr} sur des maillages $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ et $\Delta_x = 150\mu\text{m}$, le pic d'AI de flamme froide (LTC) apparaît autour de $t = 1.0\text{ms}$ Fig.6.44a et 6.44c. Toutefois, l'AI de flamme chaude (HTC) survient autour de $t = 1.4\text{ms}$ pour l'expérience contre $t = 1.8\text{ms}$ pour les simulations Fig.6.44a et 6.44c.

L'amplitude du pic de dégagement d'énergie associé à l'AI de flamme chaude (HTC) varie d'environ $\pm 30\%$ selon le maillage, et la durée de ce pic est surestimée d'un facteur proche de 2.0. Cela se traduit par une surestimation de dégagement d'énergie particulièrement prononcé pour TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ Fig.6.44a. De plus, le pic d'AI (HTC) est plus raide dans l'expérience que dans les simulations, suggérant un allumage brutal et homogène à travers la chambre, contrairement à une AI plus progressive pour les calculs TFM-M2_{destr} et TKI-ECFM.

L'origine du retard à l'AI (HTC) n'est pas triviale puisqu'elle peut provenir de diverses raisons :

- Le schéma cinétique utilisé comporte 54 espèces et 269 réactions, nombre réduit pour rendre compte de phénomènes complexes comme un AI stratifié multi-carburant. L'imprécision du schéma réduit pourrait donc être à l'origine d'écarts en termes de délais d'AI.
- La dispersion du jet différente entre l'expérience et le numérique peut générer des écarts de richesse maximale en carburant pilote (ϕ_{max}), représentant ici la fraction de mélange la plus réactive Z_{MR} . En d'autres termes, une sous-estimation de ϕ_{max} pourrait entraîner une diminution de la réactivité du mélange et donc une augmentation des délais d'AI.
- La représentation de l'AI s'appuie, pour TKI, sur une tabulation 0D des taux de réaction, et pour TFM-M2_{destr} sur une résolution directe de la chimie. Toutefois, ces deux approches considèrent le mélange homogène à l'échelle de la cellule, et les phénomènes de micro-mélange à une échelle inférieure à Δ_x sont négligés. La possible influence sur l'AI de gradients non-résolus n'est donc pas prise en compte. Bien que les forts gradients de mélange tendent généralement à retarder l'AI [7, 60, 68, 77], la tendance inverse a également été rapportée [28, 99]. Leur non prise en compte par les approches TKI et TFM-M2_{destr} pourrait alors potentiellement expliquer le retard à l'AI des simulations par rapport à l'expérience. La responsabilité de ces effets n'a toutefois pas été investiguée, car potentiellement longue et coûteuse en temps de calcul, en développement, ainsi qu'en analyse.

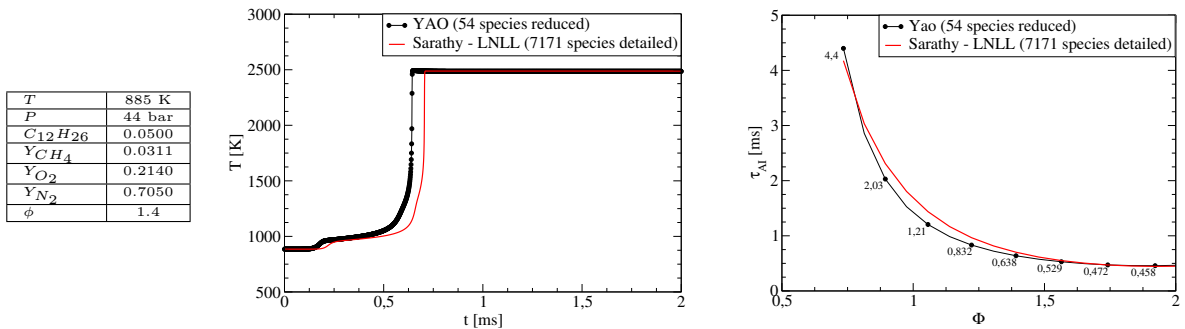


FIGURE 6.45 – Comparaison des délais d'AI (réacteur 0D, pression constante) entre le schéma réduit de Yao *et al.* [128] et le schéma détaillé de Sarathy *et al.* [102]. Des écarts inférieurs à 10% sont relevés dans les conditions testées ici, traduisant une validité satisfaisante du schéma réduit. L'extrapolation de la ligne de mélange du cas 3D révèle une réactivité supérieure pour des richesses supérieures à $\phi = 1.4$. Cela suggère qu'une dissipation trop rapide du jet pilote (décroissance trop rapide de ϕ_{max}) entraîne une augmentation des délais d'AI comparable aux écarts de délais d'AI observés dans les calculs 3D.

Afin d'étudier la responsabilité du schéma cinétique sur le retard à l'AI (HTC), le schéma de Yao *et al.* [128] utilisé pour les simulations est comparé en AI au schéma détaillé de Sarathy *et al.* [102] (7171 espèces, 38324

réactions) dans des conditions identiques à celles où survient l'AI des calculs numériques Fig.6.45a. Le schéma réduit affiche des délais d'AI très proches de ceux du schéma détaillé (moins de 10% d'écart) ce qui tend à limiter la responsabilité de la chimie réduite dans le retard à l'AI des simulations Fig.6.44.

Afin d'étudier l'influence de la formation du mélange sur les délais d'AI, la ligne de mélange des simulations est extrapolée de façon à obtenir des conditions "fictives" dans l'hypothèse où la dispersion du jet (et donc la décroissance de la richesse locale maximale ϕ_{max}) serait plus lente et la richesse maximale supérieure lors de l'AI (HTC) Fig.6.45b. La ligne de mélange choisie est donc celle rencontrée lors de l'AI (HTC) à $t = 1.8\text{ms}$. Si les conditions à $\phi = 1.4$ entraînent une AI (HTC) à $t = 0.62\text{ms}$, des conditions "fictives" plus riches telles que $\phi = 1.6$ entraîneraient une AI (HTC) à $t = 0.50\text{ms}$, représentant un raccourcissement proche de 20%, comparable à l'écart de délais entre l'expérience et les simulations. Une dispersion différente entraînant une richesse locale maximale ϕ_{max} supérieure pourrait alors expliquer (du moins en partie) le retard à l'AI (HTC) observé.

6.6.2 Signaux de chimiluminescence

Une comparaison entre les résultats issus de l'expérience et du calcul TFM-M2_{destr} - $\Delta_x = 200\mu\text{m}$ est réalisée sur la base d'une analyse des radicaux CH_2O (traceur LTC) et OH^* (traceur HTC) Fig.6.47. Le schéma cinétique de Yao et al. [128] est considéré représentatif du chemin réactionnel réel, avec des chimies de flamme froide (LTC) et chaude (HTC) respectivement marquées par une concentration importante en CH_2O et OH . Ainsi, la chimie de flamme froide détectée par chimiluminescence CH_2O est comparée aux champs de CH_2O issus des simulations numériques. De même, le contour des noyaux de chimie de flamme chaude détecté par chimiluminescence OH^* est comparé à des iso-valeurs de concentration OH . Les champs CH_2O Fig.6.47 sont adimensionnés par la concentration maximale locale en CH_2O relevée au cours de l'expérience.

Ainsi, pour les cas expérimentaux et numériques :

- Le premier instant sélectionné correspond à une forte augmentation de la concentration en CH_2O , assimilée au pic d'AI de flamme froide Fig.6.47a et 6.47d. Cet instant survient à $t = 1.0\text{ms}$ pour le cas expérimental et numérique.
- Le second instant correspond à une forte croissance de la concentration en OH^* assimilée au pic d'AI de flamme chaude Fig.6.47b et 6.47e. Celle-ci survient autour de $t = 1.4\text{ms}$ et $t = 1.8\text{ms}$ respectivement pour le cas expérimental et numérique.
- Le troisième instant est considéré représentatif d'une propagation de flamme pré-mélangée établie (i.e. transition AI→déflagration terminée) Fig.6.47c et 6.47f. En effet, les instants $t = 3.0\text{ms}$ et $t = 3.5\text{ms}$ sélectionnés interviennent respectivement 1.6ms et 1.7ms après l'AI de flamme chaude (HTC) du cas expérimental et numérique. Or, d'après l'étude 1D menée au chapitre 4, le temps d'établissement d'un front de flamme pré-mélangée à partir d'un noyau d'AI est de l'ordre de 1.0ms. Les instants sélectionnés sont alors considérés principalement pilotés par un régime de déflagration.

AI de flamme froide (LTC) : L'instant $t = 1.0\text{ms}$ Fig.6.47a et 6.47d affiche une concentration maximale en CH_2O à la fois pour le cas expérimental et numérique.

✓ Pour le cas expérimental, une plus forte concentration en CH_2O est rencontrée en bout de jet. Ainsi, d'après Srna [115], cette concentration supérieure en CH_2O témoigne d'une richesse élevée en carburant pilote. Ces constats s'appuient sur les travaux de Dahms et. al [28] suggérant que la concentration en CH_2O durant l'AI de flamme froide (LTC) est proportionnelle à la richesse en carburant pilote, jusqu'à des richesses de l'ordre de $\phi \approx 5.0$.

✓ Pour le calcul numérique, une distribution plus disparate est rencontrée : Des poches de forte concentration en CH_2O apparaissent dans l'ensemble du jet, et non exclusivement à l'extrémité supérieure.

AI de flamme chaude (HTC) : Les instants $t = 1.4\text{ms}$ Fig.6.47b et $t = 1.8\text{ms}$ Fig.6.47e assimilés à l'AI de flamme chaude (HTC) affichent une diminution de la concentration en CH_2O .

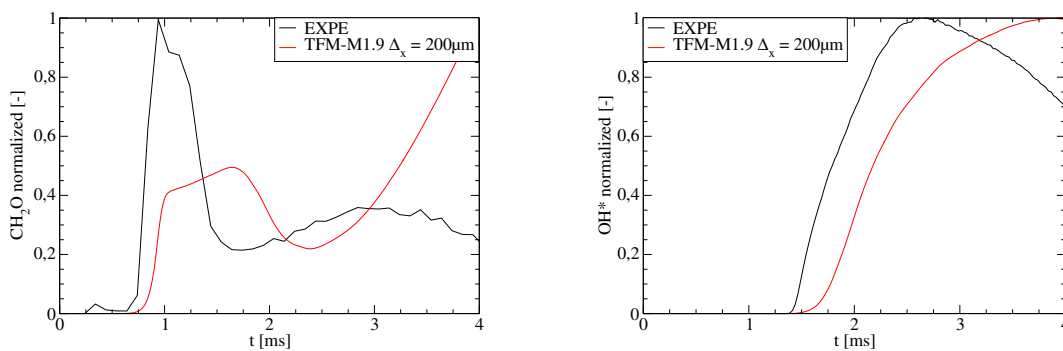
✓ Pour le cas expérimental Fig.6.47b, l'AI (HTC) s'accompagne d'une forte diminution de la concentration maximale en CH_2O . Cette diminution est plus marquée au voisinage du contour du signal OH^* , et témoigne de la consommation du radical CH_2O par les réactions de flamme chaudes se déroulant en bout de jet. De même, l'AI (HTC) survient dans une région mettant en jeu une concentration en CH_2O maximale avant l'allumage, assimilée à une richesse en carburant maximale. D'après Srna [115], la fraction de mélange la plus réactive correspond donc aux points de richesse maximale (i.e. $Z_{MR} = Z_{max}$). Cette consommation est relativement soudaine puisqu'elle s'étend à une large étendue spatiale du jet sur environ 0.1ms à 0.2ms (instants antérieurs à l'AI de flamme chaude non montrés ici). Cela est compatible avec un allumage homogène et simultané d'un volume de gaz important (ou un "départ en masse").

✓ Pour le calcul numérique, les noyaux d'AI (HTC) s'accompagnent également d'une disparition du radical CH_2O Fig.6.47d, indiquant sa consommation par les réactions de flamme chaude, tendance similaire à l'expérience. Toutefois, ces noyaux apparaissent de façon disparate dans l'ensemble du jet, suggérant une AI plus dispersée contrastant avec le noyau d'AI homogène observé dans l'expérience.

Propagation de flamme : Les instants, $t = 3.0$ ms Fig.6.47c et $t = 3.5$ ms Fig.6.47f assimilés à un régime de propagation de flamme pré-mélangée affichent une nette atténuation du signal CH_2O .

✓ Pour le cas expérimental, le contour OH^* englobe l'ensemble du jet (contours Schlieren et OH^* confondus), suggérant que les réactions de flamme chaude s'appliquent à l'ensemble de la surface du jet. Cela est compatible avec la propagation d'un front de flamme pré-mélangée à travers la chambre, sans toutefois en fournir la preuve. Au regard de l'étude 1D (chapitre 4), l'instant $t = 3.0$ ms est considéré suffisamment ultérieur à l'AI (HTC) pour être piloté essentiellement par un régime de déflagration (i.e. temps de transition AI→déflagration atteint). En outre, un fond de chimiluminescence CH_2O diffus et de faible intensité apparaît dans l'ensemble du jet. Or d'après Srna [115], des interférences avec la lumière naturelle provoquées par la flamme chaude perturbent le signal CH_2O , lequel n'est alors exploitable que jusqu'aux premiers instants de l'AI de flamme chaude (HTC). Le fond diffus rencontré à $t = 3.0$ ms ne traduit donc pas la présence effective de CH_2O .

✓ Pour le calcul numérique, l'iso-valeur OH englobe l'ensemble du jet, tout comme pour l'expérience, traduisant la présence de réactions de flamme chaude sur l'ensemble de la surface du jet. Toutefois, une concentration significative en CH_2O apparaît également dans le contour du jet. Celle-ci est associée aux réactions de flamme froide se déroulant dans la zone de pré-chauffage du front de flamme épaissie. La présence de CH_2O dans le front de flamme ne résulte donc pas de l'AI de flamme froide (LTC) comme à $t = 1.0$ ms et $t = 1.8$ ms et n'est donc pas à associer à la propagation d'un régime d'AI.



(a) Signal intégral CH_2O adimensionné. Apparition des réactions de flamme froide (LTC) autour de $t = 1.0$ ms pour les cas expérimental et numérique.

(b) Signal intégral adimensionné OH^* (expé) et OH (numérique). Apparition des réactions de flamme chaude (HTC) autour de $t = 1.4$ ms (expérimental) et $t = 1.8$ ms (numérique).

FIGURE 6.46 – Évolution temporelle des concentrations en CH_2O , OH^* (expérimental) et OH (numérique). La chimie de flamme froide apparaît (via CH_2O) à des instants proches entre l'expérience et le calcul, contrairement à la chimie de flamme chaude montrant (via OH^*) un décalage proche de 0.4ms.

Afin de discuter l'apparition des réactions de flamme froide (LTC) et chaude (HTC) de façon globale, une comparaison de la concentration moyenne en CH_2O , OH^* , OH , est présentée Fig.6.46. Pour l'expérience, la

concentration en CH_2O est obtenue par intégration du signal chimiluminescent CH_2O -PLIF selon le plan de visualisation (intégration planaire) et la concentration en OH^* par l'intégration volumique du signal chimiluminescent OH^* . Pour le calcul numérique, une intégration massique sur tout le domaine des espèces considérées (CH_2O et OH) est réalisée.

Ainsi, l'expérience affiche un pic de signal CH_2O entre $t = 0.8\text{ms}$ et $t = 1.4\text{ms}$, tandis que celui du calcul s'étend plus largement entre $t = 0.8\text{ms}$ et $t = 2.0\text{ms}$ Fig.6.46a. Cela est attribué au retard à l'AI (HTC) des calculs numériques permettant une persistance plus longue des réactions de flamme froide. Pour le calcul, une croissance globalement linéaire de la concentration en CH_2O à partir de $t = 2.5\text{ms}$ est notée. Elle est attribuée à la présence de cette espèce dans la zone de pré-chauffage du front de flamme épaissie, dont la propagation génère la croissance du signal CH_2O . Cet effet est absent du signal expérimental car la résolution de la caméra ne permet pas de capter un éventuel signal CH_2O dans le front de flamme.

L'expérience et les calculs numériques affichent respectivement une forte croissance du signal OH^* à partir de $t = 1.4\text{ms}$ et OH à partir de $t = 1.8\text{ms}$ Fig.6.46b. Cette croissance s'explique par les réactions de flamme chaude générant une augmentation de la concentration en radical OH à travers la chambre. L'expérience affiche toutefois une diminution de l'intensité du signal OH^* après $t = 2.5\text{ms}$. Cet effet provient, d'après Srna [115], de la dépendance en température et richesse des propriétés de rayonnement de OH^* , paramètres variant au cours de la propagation du front de flamme (propagation du spray pilote riche vers un mélange air/ CH_4 pauvre, et variation de la température des gaz à mesure de leur combustion).

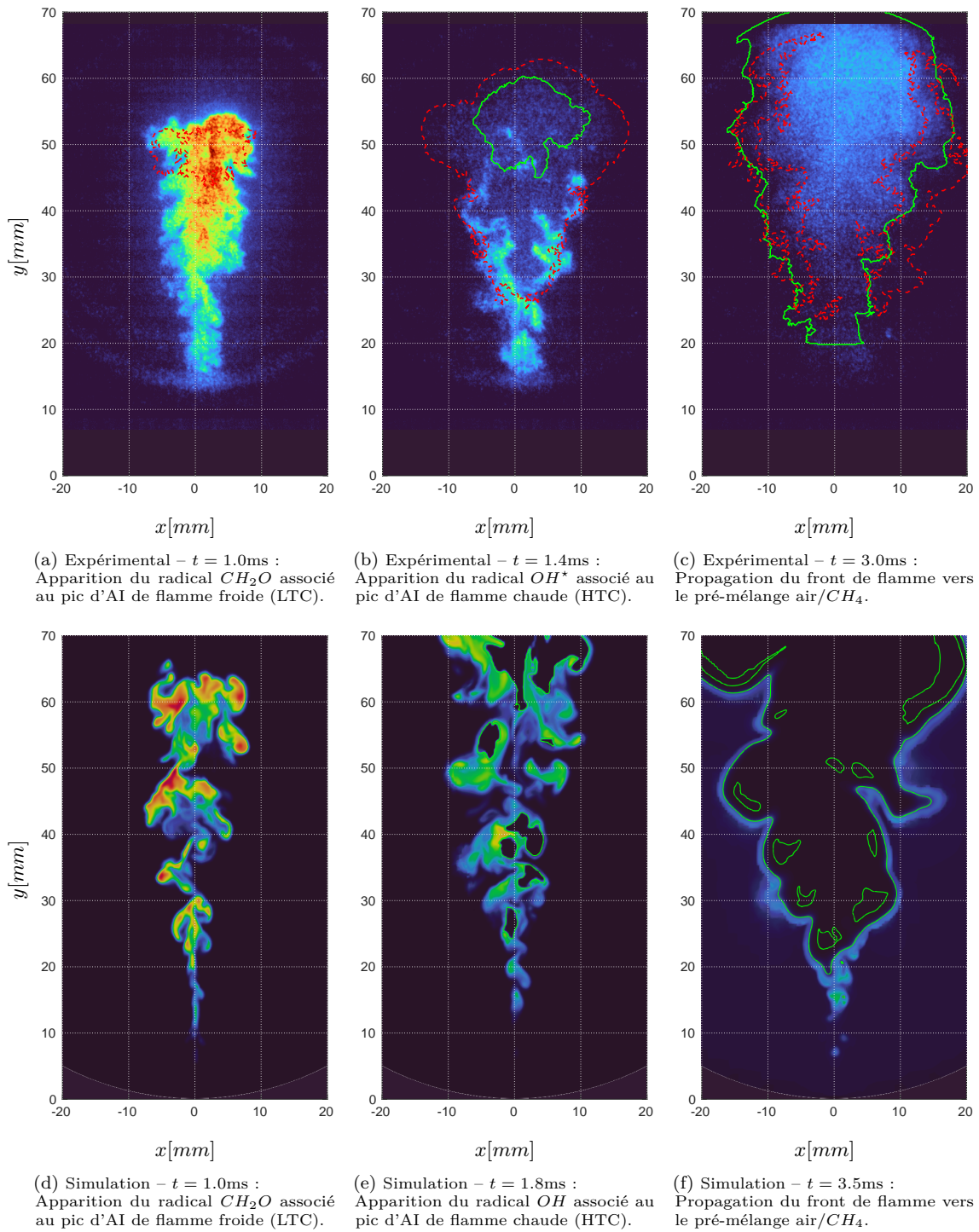


FIGURE 6.47 – Champs expérimentaux et numériques ($\Delta_x = 200\mu\text{m}$) de concentration en CH_2O , radical associé à la chimie de flamme froide (LTC). L'iso-valeur rouge désigne le contour du jet issue du signal Schlieren (expérimental). L'iso-valeur verte désigne le contour du noyau de flamme chaude (HTC).

6.7 Conclusions du chapitre

Les modèles TFM-M2_{destr} et TKI-ECFM ont été appliqués à un cas expérimental Dual-Fuel présent à l'ETH Zurich, et utilisé durant les travaux de Srna [115].

- Premièrement, la capacité du modèle TFM-M2_{destr} à représenter une transition AI→déflagration sur la base d'une relaxation du facteur d'épaissement, est discutée. Ainsi, la comparaison avec le calcul no-model révèle que TFM-M2_{destr} est capable d'assurer la propagation d'un front de flamme pré-mélangée épaissie après un temps de relaxation vers \mathcal{F}_{target} de l'ordre de 1.0ms, sans présenter un caractère inhibiteur entraînant une augmentation des délais d'AI, à l'instar de TFM-M0.
- Deuxièmement, la capacité du modèle TKI-ECFM à représenter une transition AI→déflagration à partir d'un dépôt de surface de flamme piloté par une condition d'avancement $\tilde{c}_{AI}^{seuil} > 0.5$, est discutée. Les calculs TKI-ECFM affichent une proximité notable avec les calculs TFM-M2_{destr} (et plus particulièrement pour $\Delta_x = 150\mu\text{m}$) en termes de délais d'AI et de dégagement de chaleur. Cette proximité est notamment attribuée aux faibles gradients de mélange mis en jeu par ce cas précis. Toutefois, le dégagement de chaleur est dominé par ECFM très rapidement (environ 0.1ms) après l'AI, suggérant l'établissement rapide d'un régime de déflagration. À l'inverse, TFM-M2_{destr} implique l'établissement d'un régime de propagation de flamme de façon beaucoup plus progressive (sur une durée d'environ 1.0ms), en raison du temps de relaxation vers \mathcal{F}_{target} introduit. Ce temps de relaxation de l'ordre de 1.0ms est cependant comparables aux temps de transition AI→déflagration τ_{trans} observés dans l'étude fondamentale 1D (chapitre 4). De même, certaines différences significatives en termes de dégagement d'énergie entre les calculs TKI-ECFM et TFM-M2_{destr} sont observées sur le maillage $\Delta_x = 200\mu\text{m}$: deux "vagues" d'AI de flamme chaude apparaissent pour TKI-ECFM, contre une seule pour TFM-M2_{destr}. Ces écarts sont essentiellement attribués à des effets aérodynamiques affectant la formation du mélange, et ne peuvent pas être directement imputés à la modélisation de la combustion, ou à un effet direct de la résolution.
- Troisièmement, les résultats des simulations sont comparés aux mesures expérimentales. Les principales caractéristiques du jet (pénétration, allure globale) en conditions réactives et non-réactives sont reproduites de façon relativement satisfaisante, bien que l'expérience affiche un jet légèrement plus ouvert et une longueur de pénétration inférieure. Néanmoins, les calculs réactifs affichent un retard de l'AI (HTC) de l'ordre de 0.4ms (soit environ 20% du délai expérimental), se révélant problématique puisqu'il représente plusieurs degrés vilebrequin en conditions typiques moteurs. Des éléments liés à la préparation du mélange (dispersion du jet) sont potentiellement à l'origine de ces écarts. En effet, il a été montré qu'une dispersion trop rapide du jet entraînant une décroissance importante de la richesse maximale locale favoriserait une baisse de la réactivité, et donc un retard à l'AI. Par ailleurs, la non-prise en compte d'effets de micro-mélange de sous-maille pourrait aussi expliquer les écarts de délais d'AI (HTC) avec l'expérience. La responsabilité des aspects susmentionnés n'a toutefois pas été démontrée formellement.
- Quatrièmement, le surcoût de temps de calcul de l'approche TFM-M2_{destr} par rapport à TKI-ECFM (facteur 5) ne semble pas justifié au vu de la proximité des résultats fournis par les deux approches. Toutefois, une approche à chimie résolue telle que TFM-M2_{destr} a montré sa capacité à capter l'influence d'effets de dissipation scalaire résolus sur l'AI (cas A15, section 5.5.6), là où l'approche TKI montrait ses limites (cas A15, section 5.3.2.1). En pratique, l'utilisation du modèle TFM-M2_{destr} peut se justifier dans des conditions où les gradients de mélange résolus influent significativement sur l'AI, tout comme le cas A15 en configuration 1D. L'influence d'effets de dissipation scalaire résolus serait alors correctement prise en compte par TFM-M2_{destr}, sans effort de modélisation supplémentaire. Les gradients non-résolus ne seraient toutefois pas pris en compte, mais l'utilisation d'AMR dans les régions plus fortement stratifiées permettrait d'en limiter l'influence, ce qui offre des perspectives encourageantes en vue d'applications LES moteur 3D.

Vers une application moteur

Ce chapitre vise à appliquer le modèle TFM-M2_{destr} à un cas moteur LES 3D Dual-Fuel, afin d'étudier sa capacité à représenter la transition AI→déflagration en conditions "réelles". Le besoin d'adaptations pour assurer un fonctionnement générique est également discuté. Ainsi, TFM-M2_{destr} est appliqué à une configuration numérique représentative du moteur ICAMDAC présent à IFPEN. Ce dernier est un moteur d'étude, mono-cylindre downsizé à injection directe, et comporte quatre soupapes. Initialement prévu pour l'étude de combustions anormales (instabilités de combustion, cliquetis) en configurations LES, notamment dans le cadre des travaux de Misdariis [73], Robert [97], cette configuration est également reprise par Mouriaux [76], pour la modélisation du plissement de flamme dans le cadre d'un allumage par bougie. Dans le cas présent, la configuration numérique ICAMDAC est modifiée de façon à représenter un point de fonctionnement moteur typique Dual-Fuel, dans lequel un pré-mélange air/CH₄ est allumé par un spray pilote de n-dodécane.

7.1 Présentation du cas ICAMDAC

L'étude ICAMDAC originelle comprend un plenum d'entrée et de sortie. Toutefois, l'étude présente se limite à la chambre de combustion et aux tubulures d'admission et d'échappement Fig.7.1a. Un maillage cartésien uniforme d'une résolution $\Delta_x = 400\mu\text{m}$ dans la chambre, et $\Delta_x = 800\mu\text{m}$ dans les tubulures est utilisé.

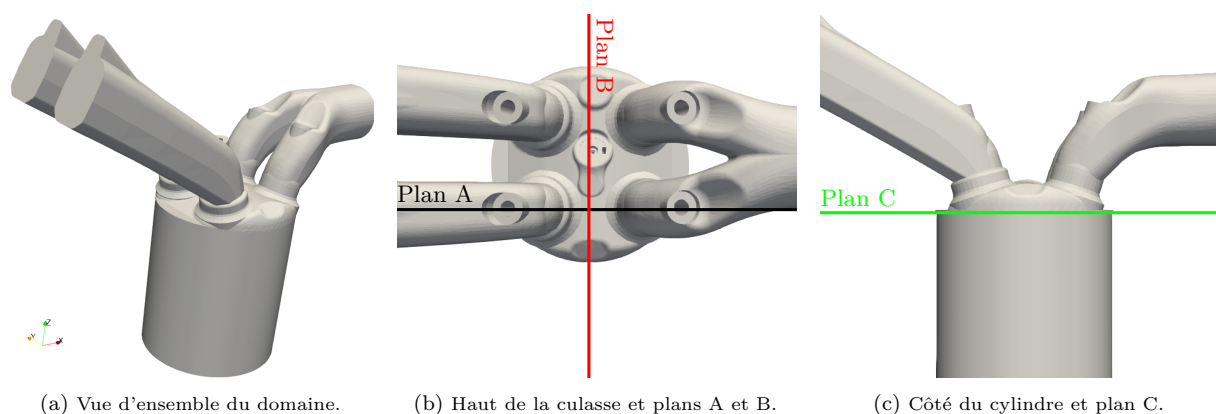


FIGURE 7.1 – Illustration du mono-cylindre ICAMDAC. Les tubulures d'admission et d'échappement se situent respectivement à gauche et à droite. Le plan A coupe les soupapes d'admission et d'échappement en leurs centres, le plan B correspond à celui des injecteurs n-dodécane, le plan C coupe horizontalement la chambre de combustion au niveau du PMH.

Un mélange homogène air/CH₄ est introduit par la tubulure d'admission tandis qu'un injecteur pilote n-

dodécane à deux trous est disposé au centre de la chambre, à une distance de 1.0mm de la culasse. Trois plans de coupe (A, B, et C) sont utilisés dans la suite Fig.7.1b et 7.1c pour faciliter la compréhension du calcul.

7.1.1 Conditions aux limites

Les frontières ouvertes du domaine se résument aux extrémités des tubulures d'admission et d'échappement. Une composition air/ CH_4 à richesse $\phi = 0.58$ et $T = 300K$ est imposée en entrée des tubulures d'admission. Une pression constante $P_{adm/ech}^{lim} = 1.8bar$, et des conditions de gradients nuls sont imposées aux frontières des tubulures d'admission et d'échappement. Les flux pariétaux de l'ensemble des frontières sont traités par des lois de parois identiques à celles utilisées pour l'étude académique du chapitre 6, et la même correction du facteur d'épaissement \mathcal{F}_{target} est appliquée à proximité des parois afin de limiter la sur-estimation des pertes thermiques (section 6.3.4.1). L'ensemble des éléments de la chambre (culasse, piston, soupapes, cylindre) possède des températures évoluant au cours du cycle basées sur des mesures moteur expérimentales, non détaillées ici.

7.1.2 Conditions initiales

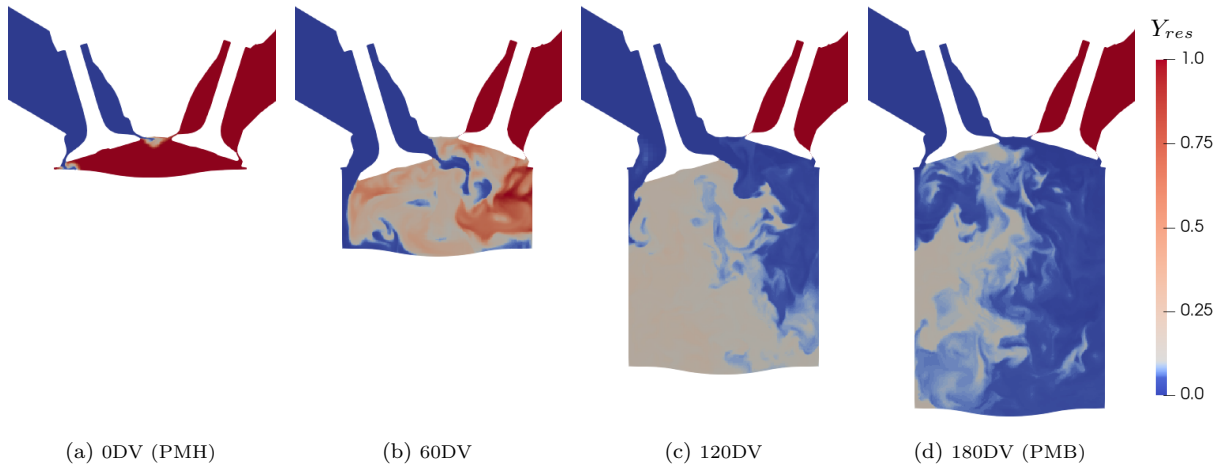


FIGURE 7.2 – Phase d'admission : Évolution du mélange entre les gaz frais admis, et les gaz brûlés résiduels présents dans la chambre initialement. Les gaz résiduels représentent environ 7% de la masse totale de gaz présente dans la chambre en fin d'admission. Soupape d'admission à gauche et échappement à droite.

L'étude vise uniquement à montrer que toutes les fonctions du modèle TFM-M2_{destr} sont opérationnelles pour permettre la réalisation d'un calcul moteur Dual-Fuel en conditions réelles (compositions variables, stratifications en richesse et carburant, pressions et températures variables). Un cycle unique est alors simulé, afin de réduire le coût et le temps de calcul. Ainsi, le calcul débute à $-20DV$ et se termine à $720DV$.

Une composition homogène air/ CH_4 à richesse $\phi = 0.58$, $T = 300K$, et $P_{adm}^{init} = 1.8bar$ est imposée dans les tubulures d'admission (conditions initiales identiques aux conditions aux limites des tubulures d'admission). Afin d'imiter la présence de gaz brûlés résiduels d'un cycle antérieur, une composition homogène correspondant aux produits de combustion du mélange air/ CH_4 admis, est imposée dans la chambre et la tubulure d'échappement, à température $T = 700K$. Ces conditions correspondent à des valeurs typiques de fin de détente. La pression dans les tubulures d'échappement vaut $P_{ech}^{init} = 1.8bar$ (identiquement aux conditions aux limites des tubulures d'échappement).

Les gaz brûlés résiduels contenus dans le volume mort de la chambre Fig.7.2a sont mélangés avec les gaz frais provenant de la tubulure d'admission. La fraction massique de gaz brûlés décroît alors à des valeurs comprises entre $0.0 \lesssim Y_{res} \lesssim 0.20$ en fin d'admission Fig.7.2b à 7.2d. La masse de gaz résiduels représente finalement environ 7% de la masse totale présente dans la chambre. La présence de ces gaz introduit toutefois un biais dans la description

de l'avancement, puisqu'une valeur relativement homogène $c \approx 7\%$ (relative aux 7% de masse de GB résiduels) est notée à 340DV Fig.7.4a alors que l'allumage n'est pas encore survenu. La définition de l'avancement utilisée ici n'est pas prévue pour tenir compte des mélanges GF/GB, et apparaît donc inadaptée. Toutefois, comme détaillé en section 7.3, le biais de 7% du calcul de l'avancement ne perturbe pas le fonctionnement de TFM-M2_{destr}.

7.1.3 Point de fonctionnement

Le point de fonctionnement choisi est à un régime de 3600tr/min. Une masse de méthane $m_{CH_4} = 17.5\text{mg}$ est introduite par la tubulure d'admission à travers un pré-mélange homogène air/ CH_4 de richesse $\phi_{CH_4} = 0.58$, tandis qu'une masse de spray n-dodécane $m_{C_{12}} = 6.0\text{mg}$ est injectée entre 315DV et 360DV. La masse combustible est alors composée à 25% de n-dodécane, et 75% de méthane, conditions compatibles avec des points de fonctionnement moteur Dual-Fuel.

L'injection pilote s'effectue dans le plan B Fig.7.1b et selon un angle de 23° par rapport à l'horizontale Fig.7.3. La non-symétrie apparente des jets est attribuée à une distorsion due aux mouvements aérodynamiques dans la chambre, et non à une différence dans les paramètres d'injection.

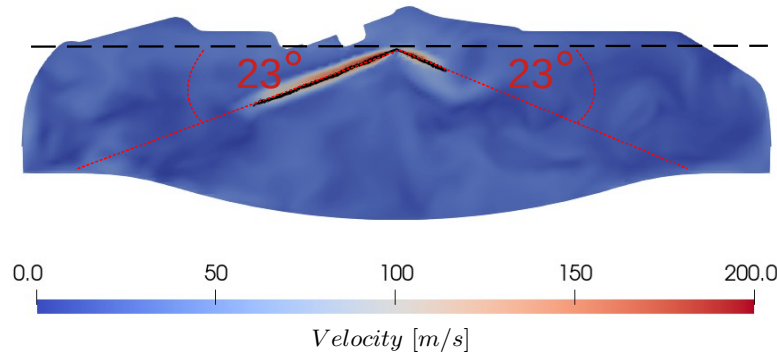


FIGURE 7.3 – Plan B : Illustration du champ de vitesse durant l'injection pilote *n*-dodécane, à 340DV. Le sillage des jets s'accompagne de vitesses proches de 200m/s , tandis que les vitesses d'ensemble rencontrées en périphérie avoisinent les 50m/s . Les particules lagrangiennes sont représentées en noir.

7.2 Comportement global

L'AI (HTC) survient à la fin de l'injection pilote s'étendant entre 315DV et 360DV (PMH), dans deux noyaux proches de la paroi, et situés dans l'axe du jet Fig.7.4b. Un dégagement de chaleur de faible intensité apparaît entre 350DV et 360DV et est attribué à la chimie de flamme froide (LTC) Fig.7.7a. L'AI de flamme chaude (HTC) survient autour de 360DV dans les régions les plus riches telles que $\phi_{max} \approx 2.5$ Fig.7.6b. La combustion du mélange est assez rapide puisqu'autour de 380DV, l'intégralité du carburant pilote, et environ 70% de la masse de méthane sont consommés Fig.7.8b. La combustion du méthane s'étend toutefois jusque 440DV, bien que de façon moins intense au vu du dégagement de chaleur, voir encadré Fig.7.7a.

Au regard la forte réactivité du carburant pilote, la consommation du n-dodécane est associée en première approximation, à la prédominance d'un régime d'AI. Ainsi, le pic de dégagement de chaleur entre 360DV et 380DV Fig.7.7a concorde avec la consommation du carburant pilote Fig.7.8b, et est attribué à un régime d'AI. Par opposition, la faible réactivité du mélange air/ CH_4 est associée à la prédominance d'un régime de déflagration. De fait, la masse de méthane consommée entre 380DV et 440DV Fig.7.8b est associée à un régime de déflagration. Cela est mis en évidence dans TFM-M2_{destr} par la propagation d'un front de flamme épaissie, et décrit plus en détail en section 7.3.

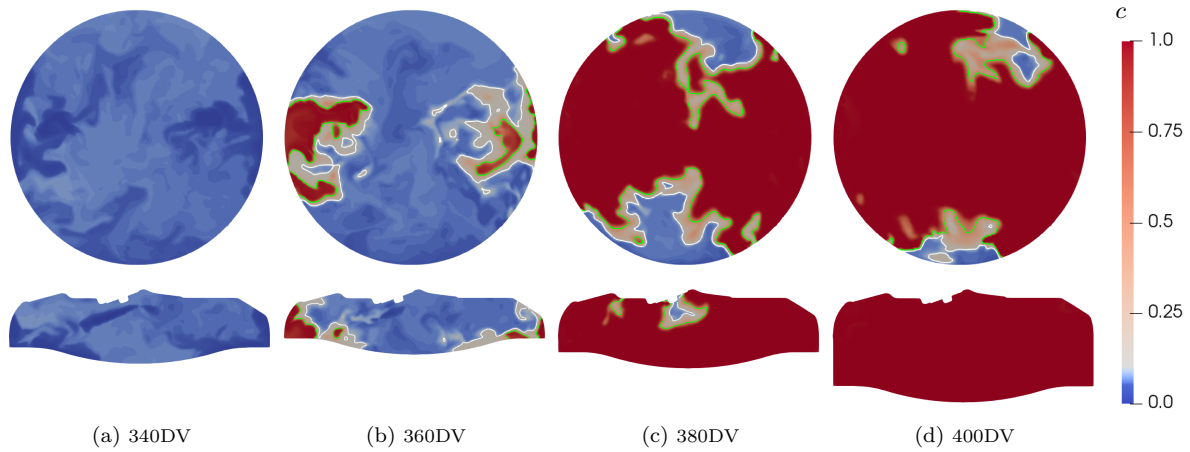


FIGURE 7.4 – Champs d’avancement c . Les gaz brûlés résiduels sont dispersés dans les gaz frais et créent un mélange homogène centré autour de $c \approx 0.07$ en fin de compression (340DV). Des noyaux d’AI se développent à partir de 360DV. Les lignes blanche et verte représentent respectivement des iso-valeurs $c = 0.05$ et $c = 0.50$.

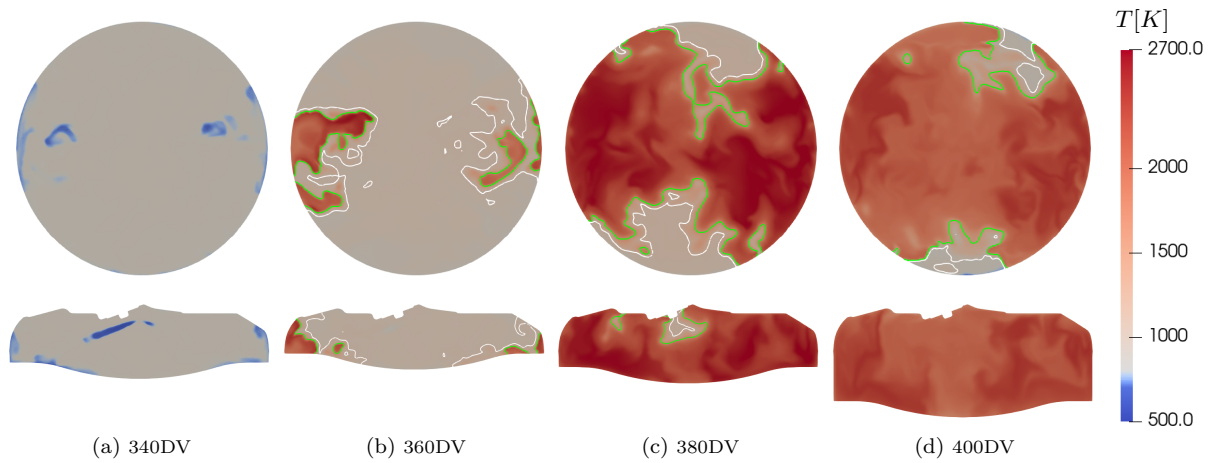


FIGURE 7.5 – Champs de température. Dans le sillage du jet, l’évaporation du spray induit un refroidissement des gaz autour de 800K (340DV). À l’allumage, la température GF côté méthane est de l’ordre de 1000K. Les lignes blanche et verte représentent respectivement des iso-valeurs $c = 0.05$ et $c = 0.50$.

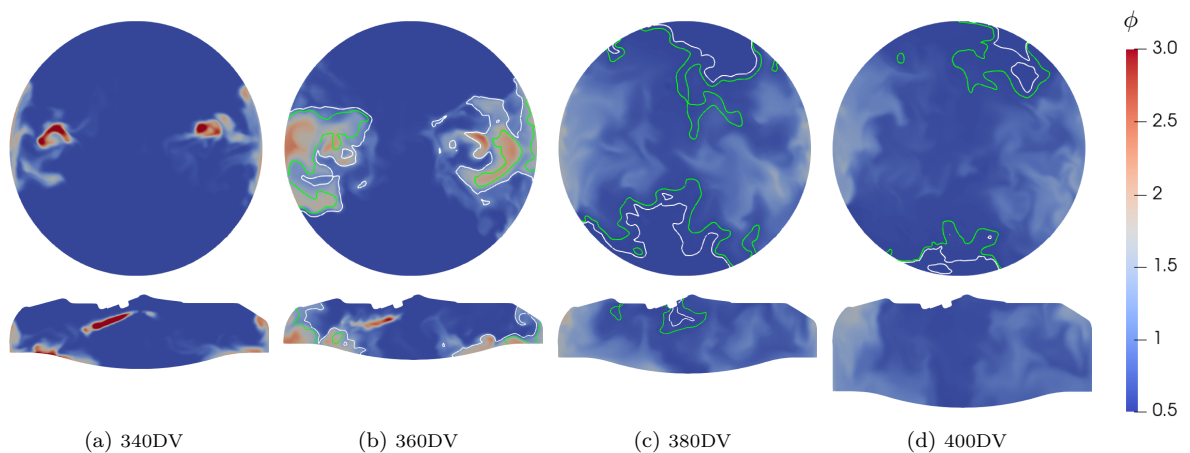
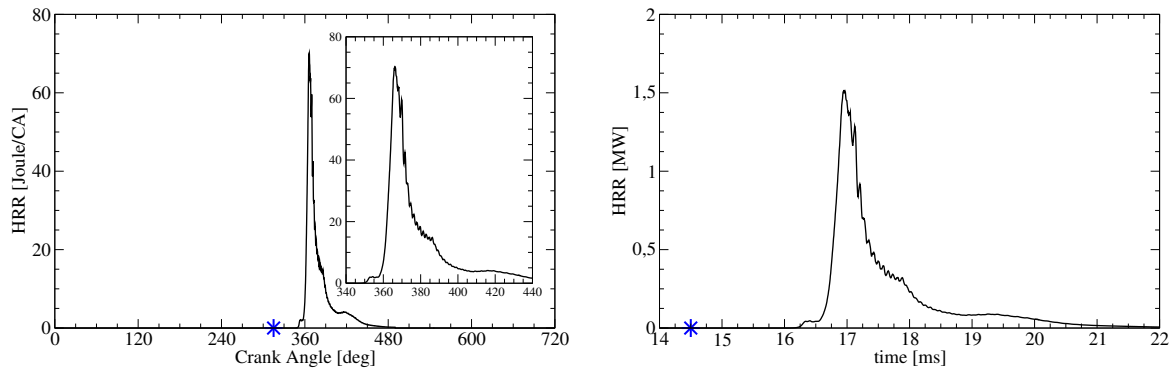
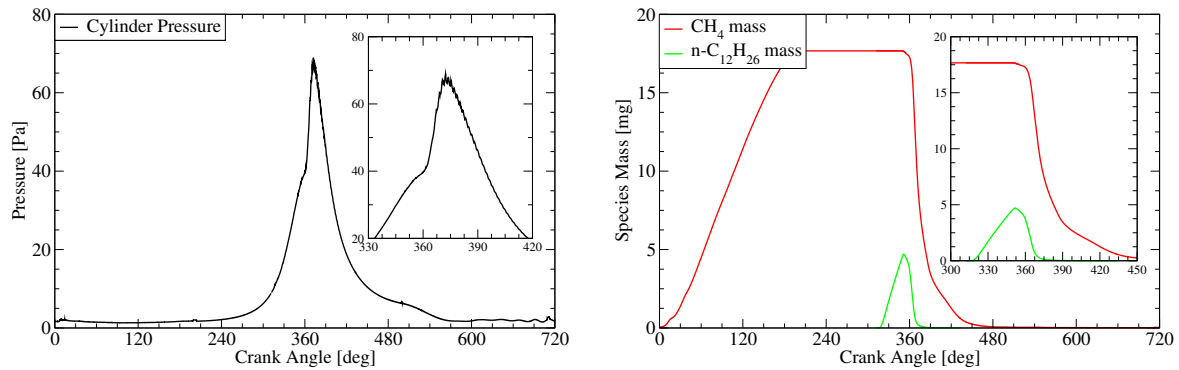


FIGURE 7.6 – Champs de richesse ϕ . La dispersion du jet dans la chambre crée deux poches plus riches telles que $\phi \approx 2.5$, dans lesquelles apparaît l’AI (360DV). Le front de réaction atteint le pré-mélange air/ CH_4 autour de 380DV. Les lignes blanche et verte représentent respectivement des iso-valeurs $c = 0.05$ et $c = 0.50$.



(a) Taux de dégagement de chaleur en Joule par degré vilebrequin. Apparition de la chimie de flamme froide (LTC) à 350DV et de flamme chaude (HTC) à 360DV. L'AI est considérée dominante entre 350DV et 380DV. (b) Taux de dégagement de chaleur dans le cylindre en mégawatt. Apparition de la chimie de flamme froide (LTC) à $t = 16.2$ ms et de flamme chaude (HTC) à $t = 16.6$ msDV. L'AI est considérée dominante entre $t = 16.2$ ms et $t = 18.0$ ms.

FIGURE 7.7 – Évolution temporelle du taux de dégagement de chaleur dans la chambre. L'ensemble de la combustion se déroule entre 360DV et 440DV (soit environ 16.0ms et 20.0ms). L'étoile bleue \star désigne le début de l'injection.



(a) Pression cylindre au cours du cycle.

(b) Masse de carburant CH_4 et n -dodécane présente dans le cylindre. Le carburant pilote est consommé entre 350DV et 365DV environ, et le méthane entre 360DV et 440DV.

FIGURE 7.8 – Évolution temporelle de la pression cylindre (gauche) et de la masse de carburant (droite) au cours du cycle.

7.3 Comportement du modèle TFM-M2_{destr}

Le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} , le facteur d'épaississement \mathcal{F} , l'indicateur de gaz brûlés $\psi_{burntgas}$, et le paramètre de sensibilité β sont représentés entre 360DV et 390DV Fig.7.9 à 7.12. Durant cette période, l'ensemble du carburant pilote et environ 80% du méthane sont brûlés Fig.7.8b. Globalement, le facteur d'épaississement prend des valeurs proches de 1.0 durant l'AI Fig.7.9d, et atteint sa valeur nominale \mathcal{F}_{target} dans le front de flamme autour de 380DV Fig.7.11d. Les différents termes du modèle sont décrits ci-après.

Le senseur de réaction \mathcal{S}_{NF} s'active essentiellement autour des zones plus réactives mises en évidence par l'iso-valeur de $c = 0.5$ Fig.7.9a, 7.10a, 7.11a et 7.12a. L'augmentation du paramètre de sensibilité β n'entraîne pas une activation hasardeuse du senseur \mathcal{S}_{NF} dans des régions GF peu réactives et éloignées du front. Toutefois, une activation de \mathcal{S}_{NF} dans des régions post-flammes est remarquée, plus spécialement durant la transition AI→déflagration Fig.7.10a et 7.11a. Celle-ci est non-désirable, car éloignée du front de réaction, mais ne semble toutefois pas attribuable à l'augmentation du paramètre β , puisqu'elle intervient aussi bien dans des régions où $\beta_{AI} = 100.0$ (mode AI), que dans des régions où $\beta_{defla} = 4.0$ (mode déflagration) Fig.7.10a et 7.11c. Cela entraîne cependant l'application d'un facteur d'épaississement indésirable dans des zones éloignées du front Fig.7.10d,

7.11d et 7.12d. Cela est également rencontré au chapitre 6, section 6.5.3.3. La transition vers le mode déflagration s'accompagne d'une diffusion "libre" de $\psi_{burntagas}$ dans les régions post-flamme Fig.7.10b, 7.11b et 7.12b, ainsi que d'une désactivation progressive de \mathcal{S}_{NF} dans les gaz brûlés Fig.7.10a, 7.11a et 7.12a, permettant in fine d'éliminer l'épaississement indésirable dans le sillage du front.

Le passage du mode AI au mode déflagration s'étend approximativement entre 360DV et 380DV (soit environ 0.9ms) pour des temps de flamme épaissie \mathcal{T}_{flamme} proches de 2.0ms. La relative proximité entre le temps de changement de mode et \mathcal{T}_{flamme} permet de préserver le relatif équilibre diffusion/réaction du front (hypothèse n°2). Il est souligné que les valeurs \mathcal{T}_{flamme} de ce calcul sont supérieures à celles rencontrées au chapitre 6 en raison du maillage plus grossier employé ($\Delta_x = 400\mu\text{m}$ contre $\Delta_x = 200\mu\text{m}$). Aussi, le paramètre de relaxation utilisé ici est tel que $\mathcal{R}_{flametime} = 0.20$. Cette valeur correspond aux valeurs testées et jugées acceptables au cours de l'étude 1D du chapitre 5, section 5.5.6.3.

La décroissance du facteur \mathcal{F} Fig.7.11d et 7.12d est attribuée à la diminution de la pression et de la température GF dans la chambre, en raison de la détente du piston. Cette décroissance ne provient donc en rien de la modélisation de la transition AI→déflagration de TFM-M2_{destr}. Il est souligné que les valeurs $\mathcal{F}_{target} \approx 250$ sont très élevées dans un contexte moteur, et viennent du maillage grossier employé pour le calcul, dont le but est une démonstration de la faisabilité sur cas moteur réel, et non une comparaison complète avec un cas expérimental. L'utilisation d'AMR permettrait (tout comme dans les calculs 3D du chapitre 6) de faire chuter les valeurs \mathcal{F}_{target} , ce qui offre des perspectives encourageantes dans le cadre d'une industrialisation de TFM-M2_{destr}. L'AMR n'a cependant pas été utilisé dans cette étude, car cela n'aurait apporté aucune plus-value sur l'évaluation du fonctionnement du modèle, et les temps de calculs auraient été sensiblement allongés.

Pour rappel, le senseur de final $\hat{\mathcal{S}}$ et l'indicateur de flamme transporté sont liés par la relation : $\hat{\mathcal{S}} = \min(\psi, 1)$. Une distribution du senseur de flamme $\hat{\mathcal{S}}$ permet de quantifier la proportion de surface de front brûlant en mode AI ($\psi < 1.0$) et en mode déflagration ($\psi = 1.0$) Fig.7.13. Ainsi, lors de l'AI (HTC) Fig.7.13a, $\hat{\mathcal{S}}$ prend des valeurs nulles dans l'ensemble du domaine, impliquant des valeurs d'épaississement proche de 1.0. La distribution évolue peu à peu, puisqu'à 370DV environ 40% du front est en mode déflagration Fig.7.13b. Une relative dominance du mode déflagration à partir de 380DV Fig.7.13c, permet la résolution du front de flamme sur un maillage LES. Néanmoins, contrairement au cas académique du chapitre 6 Fig.6.25, le mode déflagration ne se généralise pas à l'intégralité de la surface de front. En effet, à 380DV environ 25% de la surface de front est en mode AI ($\psi = 0$), ce qui implique la sous-résolution d'une partie de la surface de front Fig.7.13d. Toutefois, ce front de réaction se situe relativement proche des parois du cylindre après 380DV Fig.7.5c et 7.5d. La sous-résolution d'une partie du front est attribuée au facteur correctif appliqué à $\hat{\mathcal{S}}$ (section 6.3.4.1), visant à désactiver le facteur d'épaississement en proche-parois Eq.(6.6). Ceci ne semble donc pas mettre en évidence un défaut dans le fonctionnement du modèle.

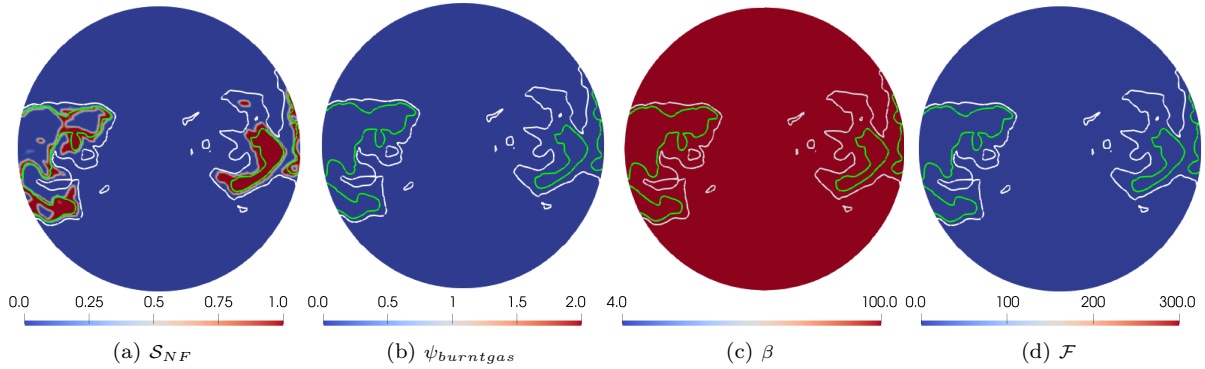


FIGURE 7.9 – 360DV : Apparition de l'AI (HTC). Les premiers noyaux d'AI sont détectés par S_{NF} . Le mode AI est omniprésent ($\beta = 100.0$), et aucun dépôt de $\psi_{burntgas}$ n'est permis. La condition $\mathcal{F} = 1.0$ omniprésente permet le développement de l'AI comme recherché. Les lignes blanche et verte représentent respectivement des iso-valeurs $c = 0.05$ et $c = 0.50$.

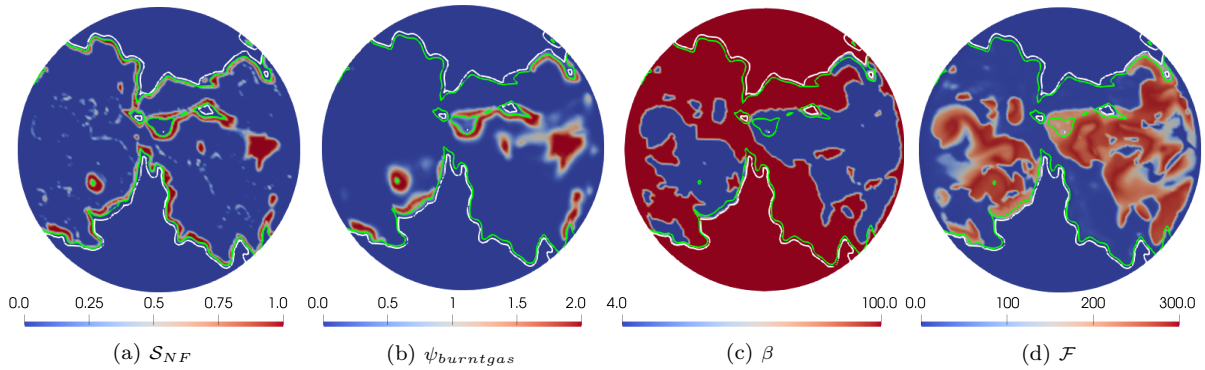


FIGURE 7.10 – 370DV : Transition AI→déflagration. Le senseur de réaction S_{NF} s'applique dans le front de réaction (comme recherché) mais aussi dans les gaz brûlés. Celui-ci entraîne la transition vers le mode déflagration et l'application du facteur d'épaississement nominal \mathcal{F}_{target} en certains points du front, mais aussi essentiellement dans les régions GB (épaississement indésirable dans les GB). Les lignes blanche et verte représentent respectivement des iso-valeurs $c = 0.05$ et $c = 0.50$.

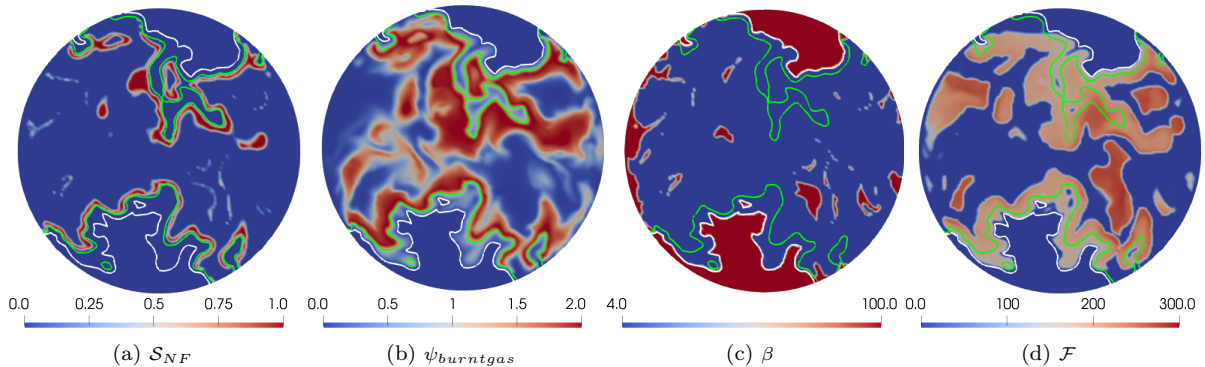


FIGURE 7.11 – 380DV : Propagation d'un front de flamme épaissie. La transition vers le mode déflagration s'applique à l'ensemble du front et permet l'application du facteur \mathcal{F}_{target} nécessaire à sa résolution. Le facteur d'épaississement apparaît désormais essentiellement dans le front de flamme et non-plus dans les régions post-flamme. Les lignes blanche et verte représentent respectivement des iso-valeurs $c = 0.05$ et $c = 0.50$.

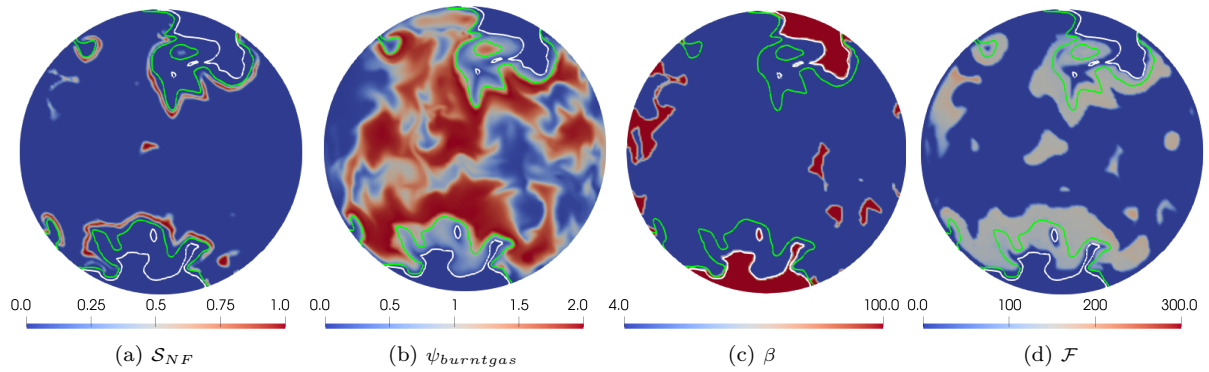


FIGURE 7.12 – 390DV : Combustion des derniers noyaux GF par le front de flamme épaissi. La disparition des réactions de post-oxydation côté GB favorise la désactivation progressive du senseur S_{NF} dans les régions post-flamme. L'épaississement indésirable rencontré dans les régions post-flamme disparaît progressivement. Les lignes blanche et verte représentent respectivement des iso-valeurs $c = 0.05$ et $c = 0.50$.

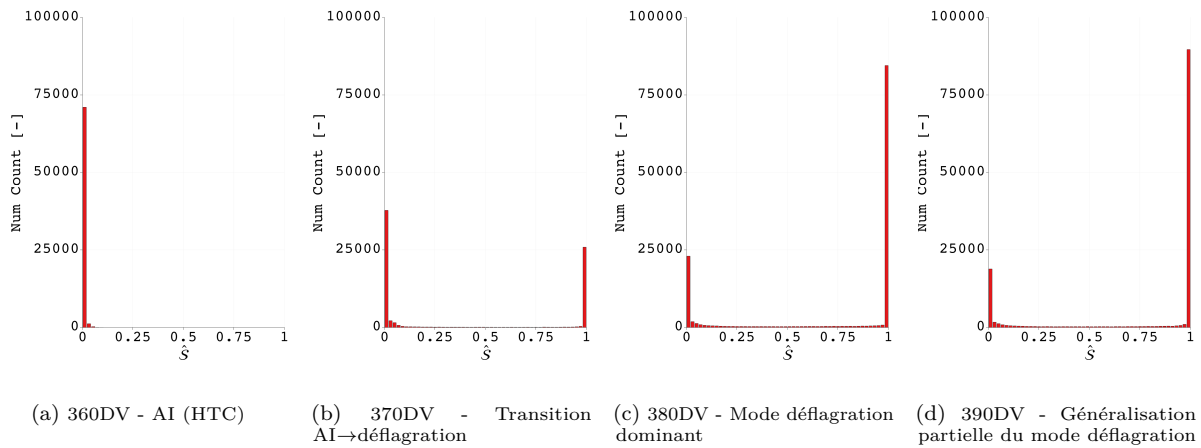


FIGURE 7.13 – Évolution temporelle de la distribution de \hat{S} . Un conditionnement tel que $0.1 < c < 0.9$ permettant d'isoler les éléments de surface de front est appliqué, afin d'évaluer la proportion brûlant en mode AI ($\hat{S} < 1.0$) et en mode déflagration ($\hat{S} = 1.0$). Aux premiers instants, la distribution est centrée autour de $\hat{S} = 0$, confirmant des valeurs d'épaississement proches de $\mathcal{F} = 1$ durant l'AI. La distribution devient progressivement centrée autour de $\hat{S} = 1$ durant la transition AI→déflagration, traduisant une relaxation du facteur d'épaississement vers sa valeur nominale \mathcal{F}_{target} . Le mode déflagration s'applique à la majorité de la surface de flamme à partir de 370DV.

7.4 Conclusions de l'approche TFM-M2_{destr} sur un cas moteur *Dual-Fuel*

Le modèle TFM-M2_{destr} a été testé sur un calcul Dual-Fuel représentatif d'une application LES moteur 3D industrielle. Tout comme pour les cas 1D du chapitre 5, et le cas académique 3D du chapitre 6, TFM-M2_{destr} apparaît capable d'assurer une relaxation de $\mathcal{F} = 1$ vers $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{target}$ sur des temps comparables à \mathcal{T}_{flamme} . Cela permet de représenter la transition AI→déflagration tout en respectant les délais d'AI, et les propriétés du modèle TFM-M0 (modèle TFM originel formulé par Jaravel [48]) en régime de déflagration. Le comportement du modèle TFM-M2_{destr} reproduit donc les caractéristiques principales attendues. Toutefois, des phénomènes de mélange côté GB, et les réactions post-flamme qui les accompagnent entraînent l'application d'un facteur d'épaississement indésirable dans le sillage du front de flamme. Ce phénomène rencontré au chapitre 6 est accentué ici, vraisemblablement en raison de l'injection plus longue et de la masse de carburant pilote supérieure amplifiant les effets de mélange susmentionnés.

La faible quantité de gaz résiduels (environ 7% en masse) du calcul présent ne semble pas constituer un biais significatif à la transition AI→déflagration s'appuyant, pour rappel, sur les conditions $c > 0.5$ et $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$, section 5.5.5. De même, la non-validité de la définition de l'avancement utilisée ici pour des richesses supérieures à $\phi \approx 2.0$, ne semble pas porter atteinte au fonctionnement du modèle TFM-M2_{destr}. Ces remarques encouragent cependant le développement d'une définition de l'avancement capable de prendre en compte les phénomènes de mélange avec des gaz brûlés résiduels, des gaz EGR, mais aussi une composition très riche potentiellement rencontrable en conditions moteur.

Par ailleurs, le temps de calcul pour un cycle complet a été d'environ 31000h (3×48h sur 216 processeurs). Le coût CPU d'un tel calcul est donc relativement élevé en raison du nombre important d'espèces transportées et de réactions calculées, comme discuté en section 6.5.6. Cela implique qu'environ 180 jours de calcul seraient requis pour simuler 30 cycles complets, nombre de cycles usuellement nécessaires pour obtenir un ensemble de données statistiquement représentatives d'un point de fonctionnement moteur en configuration LES. Au regard de la comparaison TFM vs TKI-ECFM conduite au chapitre 6, ce temps de calcul s'élèverait a priori à environ 40 jours avec le modèle TKI-ECFM. L'utilisation d'un mécanisme comportant moins d'espèces/réactions, par exemple une chimie analytiquement réduite (ARC) notamment utilisée en calcul moteur LES par Malé [66], permettrait a priori de limiter significativement le surcoût de calcul d'une approche TFM, par rapport à une approche TKI-ECFM. L'intégration d'une chimie ARC paraît donc primordiale pour une éventuelle industrialisation du modèle TFM-M2_{destr} développé dans ce travail.

En résumé, l'approche TFM-M2_{destr} semble capable de traiter les phénomènes de transition AI→déflagration dans des conditions moteur Dual-Fuel. Toutefois, des adaptations sur la définition de la variable d'avancement de même que l'introduction d'une chimie analytiquement réduite (ARC), apparaissent comme des adaptations nécessaires et prioritaires en vue d'une possible industrialisation du modèle TFM-M2_{destr}.

Quatrième partie

Conclusions et Perspectives



Conclusions globales et perspectives

Ce travail a consisté à apporter des éléments de modélisation des phénomènes transition AI→déflagration rencontrés en configurations Dual-Fuel, en vue de développer des outils de simulations prédictifs et industrialisables en contexte LES. Cette étude a alors été divisée en trois axes principaux, dont les objectifs ont été les suivants :

- Conduire une étude fondamentale de la transition AI→déflagration sur une configuration simplifiée 1D, et proposer une méthodologie d'analyse permettant de définir le régime de combustion dominant, ainsi que des critères a priori de transition AI→déflagration potentiellement utilisables en LES.
- Développer des approches de modélisation LES de la transition AI→déflagration sur la base des modèles existants et des critères de transition a priori identifiés dans l'étude fondamentale 1D. Tester ces approches dans des configurations simplifiées 1D représentatives de conditions typiques rencontrées en LES 3D Dual-Fuel, et réaliser une comparaison avec des calculs de référence.
- Évaluer les approches de modélisation développées, sur une configuration LES 3D Dual-Fuel représentative d'un banc expérimental permettant une comparaison entre les résultats numériques et expérimentaux. Évaluer l'applicabilité d'une des approches développées (TFM-M2_{destr}) sur une configuration industrielle. Proposer des axes d'amélioration en vue d'une industrialisation du modèle.

8.1 Étude fondamentale de la transition AI→déflagration

Une étude approfondie des phénomènes de transition AI→déflagration en conditions mono-carburant et bi-carburant a été réalisée dans des conditions simplifiées 1D. Des gradients de réactivité représentatifs d'applications Dual-Fuel réelles ont été modélisés par des gradients de température et/ou composition en condition initiale. Une étude extensive de différents scénarios de transition AI→déflagration a été réalisée sur AVBP, en mélange mono-carburant air/ CH_4 . Une méthodologie permettant de discriminer les régimes d'AI et de déflagration a été développée, faisant ressortir un ensemble de tendances inhérentes aux phénomènes de transition AI→déflagration. Une étude similaire réalisée sur CONVERGE en mélange bi-carburant air/ CH_4 /n-dodécane, a mis en évidence une certaine généricité de la phénoménologie, en dépit de conditions thermodynamiques différentes et de l'ajout d'un second carburant. Cela souligne donc le caractère universel et générique des tendances mises en évidence. Les principales conclusions de cette étude sont les suivantes :

- La vitesse de déplacement S_d^c et l'épaisseur du front de réaction δ_{reac} apparaissent comme des variables adéquates pour déterminer, avec une précision satisfaisante, le régime de combustion dominant. De façon générique, la transition AI→déflagration s'accompagne d'un amincissement du front de réaction, ainsi que d'une diminution de la vitesse de déplacement. Ainsi, lors de la transition AI→déflagration, l'épaisseur du front diminue de façon continue jusqu'à rejoindre une épaisseur de flamme δ_L , traduisant l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée. La même tendance est observée pour la vitesse de déplacement S_d^c , qui décroît de façon globalement continue jusqu'à des valeurs égales à S_L^c . Toutefois, la valeur d'avancement choisie pour l'étude de S_d^c peut avoir une influence significative sur l'analyse des résultats. Une valeur d'avancement relativement élevée telle que $c = 0.50$ apparaît plus adéquate qu'une valeur faible telle que $c = 0.03$ pour identifier le régime de combustion dominant.
- Les premiers instants de la transition AI→déflagration s'accompagnent globalement d'une dominance des phénomènes réactifs sur les phénomènes diffusifs. La diminution des gradients de réactivité (i.e. mélanges plus homogènes) accentuent cette dominance. Ainsi, l'établissement d'un profil de flamme pré-mélangée à partir d'un noyau d'AI s'étend, dans les conditions Dual-Fuel typiques-moteur étudiées, sur une durée τ_{trans} de l'ordre de 1.0ms. Cette durée est nécessaire à l'établissement d'un relatif équilibre diffusion/réaction caractéristique d'un régime de déflagration.
- La vitesse de déplacement du front S_d^c est en accord avec la vitesse de déplacement d'un front d'AI S_{AI}^c calculée à partir de la théorie de Zeldovich, pour de faibles gradients de réactivité (i.e. mélanges plus homogènes), impliquant des valeurs S_{AI}^c élevées. Pour des gradients de réactivité supérieurs (valeur S_{AI}^c plus faibles), les phénomènes diffusifs atteignent une amplitude comparable aux phénomènes réactifs, et la théorie de Zeldovich construite sur l'hypothèse d'effets diffusifs négligeables n'est alors plus prédictive.

8.2 Modélisation LES de la transition AI→déflagration en configuration simplifiée 1D

Deux principaux axes de modélisation de la transition AI→déflagration ont été explorés au cours de ce travail : (i) un couplage entre TKI (modèle de chimie tabulée) pour l'AI, et ECFM (modèle à transport de densité de surface de flamme) pour le régime de déflagration (approche TKI-ECFM), (ii) une approche TFM comportant une modélisation du facteur d'épaississement adaptée aux phénomènes de transition AI→déflagration (approche TFM-M2_{destr}). Les principales conclusions relatives à ces deux approches sont les suivantes :

- Sur la base de l'étude fondamentale 1D (chapitre 5), le critère de transition vers ECFM (i.e. critère de dépôt de surface de flamme) retenu dans cette étude est l'avancement d'AI \tilde{c}_{AI}^{seuil} , car considéré représentatif des premiers instants de la transition AI→déflagration (hypothèse n°1). Le couplage TKI-ECFM se montre capable de représenter des phénomènes de transition AI→déflagration pour des gradients de réactivité modérés.
- Le modèle TKI échoue à représenter l'AI en conditions fortement stratifiées pour lesquelles le rôle des phénomènes diffusifs (effets de dissipation scalaire sur le noyau d'AI) ne peuvent pas être négligés (cas A15). Une tabulation des taux de réaction sur des réacteurs 0D montre donc certaines limites dans de telles conditions. En pratique, dans ces conditions, l'AI et la transition vers ECFM n'interviennent pas aux bons instants et ne permettent pas une représentation satisfaisante de la transition AI→déflagration.
- Une approche de type no-model reposant sur une hypothèse de chimie homogène (aucune modélisation des gradients de sous-maille, en avancement ou en composition) et sur une résolution directe de la chimie se montre capable de représenter le rôle des phénomènes diffusifs pour des gradients de mélange résolu mettant en défaut l'approche TKI (cas A15). Cette capacité offre des perspectives encourageantes pour

la représentation de l'AI stratifiée en configurations LES moteur. Cependant, une approche no-model ne permet pas de représenter des phénomènes de déflagration sur un maillage LES, lesquels nécessitent une modélisation adaptée.

- Une approche modèle à flamme épaissie (TFM) permet de représenter une propagation de flamme sur un maillage LES au moyen d'un facteur d'épaississement, et d'une résolution directe de la chimie tout comme l'approche no-model. Toutefois, évalué dans sa forme originelle telle que proposé par Jaravel [48], TFM montre des difficultés à discriminer un noyau d'AI d'un élément de surface de flamme. L'application d'un facteur d'épaississement sur un noyau d'AI entraîne ainsi une forte augmentation des délais d'AI, ce qui prohibe l'utilisation de TFM dans le cadre de transitions AI→déflagration.
- Afin de résoudre une propagation de flamme épaissie tout en limitant l'influence du facteur d'épaississement sur les délais d'AI, deux versions d'un modèle TFM orienté AI→déflagration ont été proposées : TFM-M2 et TFM-M2_{destr}. Ces modèles impliquent une relaxation progressive du facteur d'épaississement vers sa valeur nominale sur des temps physiques comparables aux durées de transition AI→déflagration observés dans l'étude fondamentale 1D. Cette relaxation vise à maintenir des facteurs d'épaississement proches de 1.0 en régime d'AI de façon à en préserver la dynamique, puis à appliquer un facteur d'épaississement élevé lorsqu'un régime de déflagration est établi afin d'assurer la résolution du front sur un maillage LES. À noter que l'accroissement du facteur d'épaississement débute lorsqu'un avancement $c > 0.50$ est atteint, de façon analogue au critère $\bar{c}_{AI}^{seuil} = 0.50$ utilisé dans TKI-ECFM (hypothèse n°1). En pratique, la capacité de TFM-M2 et TFM-M2_{destr} à représenter conjointement ces deux régimes de combustion, ainsi que l'influence des phénomènes diffusifs sur l'AI (effets de dissipation scalaire) en conditions fortement stratifiée (cas A15, mettant en défaut TKI) font de ces approches de bons candidats en vue d'applications Dual-Fuel LES moteur. Cependant, pour des raisons de robustesse, le modèle TFM-M2_{destr} est considéré comme le modèle "final" de ce travail, et son utilisation plutôt que celle de TFM-M2 est préconisée. Il est cependant souligné que l'utilisation d'une approche de type TFM accentue fortement les phénomènes de mélange en conditions stratifiées, en raison des effets de sur-diffusion imputables au facteur d'épaississement. Cela génère ainsi un biais sur le dégagement de chaleur associé à la combustion des zones de mélange plus fortement stratifiées. Cela suggère le développement d'une approche de modélisation visant à éliminer cet effet.

8.3 Évaluation des approches de modélisation en configuration LES 3D Dual-Fuel

Les approches TKI-ECFM et TFM-M2_{destr} ont été testées sur une configuration 3D représentative d'un banc expérimental, présent à l'ETH Zurich, et utilisé durant les travaux de thèse de Srna [115]. En outre, un calcul no-model a été utilisé comme point de référence pour vérifier que le calcul TFM-M2_{destr} reproduit bien les caractéristiques du calcul no-model durant l'AI. Un unique point de fonctionnement a été sélectionné pour cette validation, une étude extensive sur une large étendue de points de fonctionnement étant hors de portée. Les principales conclusions de cette évaluation sont les suivantes :

- Le critère de transition $\bar{c}_{AI}^{seuil} = 0.50$ utilisé dans TKI-ECFM permet d'initier une propagation de flamme à travers la chambre, et est donc validé en configuration LES 3D Dual-Fuel.
- Le modèle TFM-M2_{destr} assure la propagation d'une flamme épaissie à travers la chambre tout en reproduisant les délais d'AI du calcul no-model. La modélisation d'un facteur d'épaississement croissant sur des durées comparables aux temps physiques de transition AI→déflagration se montre alors capable de représenter des phénomènes de transition AI→déflagration en configuration LES 3D Dual-Fuel.
- Les calculs TKI-ECFM et TFM-M2_{destr} affichent, dans les conditions testées ici, des caractéristiques similaires en termes de dégagement de chaleur (délais d'AI, propagation de flamme) et de dynamique globale (allumage dans les zones à richesse plus élevée). Les conditions thermodynamiques mises en jeu ne semblent

donc pas favorables à l'apparition de différences majeures entre TKI-ECFM et TFM-M2_{destr}, à l'inverse de certains calculs 1D étudiés précédemment (effets de dissipation scalaire du cas A15).

- Les calculs LES (TKI-ECFM tout comme TFM-M2_{destr}) affichent une proximité satisfaisante avec les champs de richesse expérimentaux. Toutefois, une surestimation de la longueur de pénétration du spray de l'ordre de 15% suggère que certains aspects liés à la formation du mélange peuvent être améliorés. En outre, bien que l'AI de flamme froide (LTC) survienne au même instant pour les calculs LES et pour le cas expérimental, l'AI de flamme chaude (HTC) survient avec un retard de l'ordre de 0.4ms (soit environ 20% du délai d'AI) dans les calculs LES. Les raisons de ce retard sont attribuées à : (i) la possible influence de gradients (d'avancement et/ou de mélange) non-résolus, dont la prise en compte n'est pas permise par l'utilisation des modèles à chimie homogène utilisés dans ce travail, (ii) une possible sous-estimation de la richesse maximale locale ϕ_{max} entraînant une augmentation des délais d'AI dans les calculs LES.
- Les calculs TFM réalisés ici impliquent la résolution directe d'une chimie relativement lourde dans un contexte de modélisation à visée industrielle (schéma de Yao et al. [128], 54 espèces). Cela permet la représentation de phénomènes complexes (AI et déflagration bi-carburant), mais engendre un surcoût de calcul important (facteur 4-5 environ) comparé à l'approche tabulée TKI-ECFM. Ce surcoût pourrait cependant se justifier dans des cas où la prédictivité de TFM serait supérieure à celle de TKI-ECFM, notamment dans des conditions d'AI fortement stratifiée, comme vu pour le cas A15 en configuration 1D.

8.4 Évaluation du modèle TFM-M2_{destr} en conditions moteur

La capacité de l'approche TFM-M2_{destr} développée dans ce travail à représenter la combustion Dual-Fuel en conditions moteur a été évaluée sur une configuration fictive dérivée du moteur ICAMDAC, mono-cylindre de recherche développé à IFPEN. Il apparaît alors que :

- Le modèle TFM-M2_{destr} est capable de fonctionner sur une configuration LES 3D Dual-Fuel représentative d'une application industrielle.
- Le modèle TFM-M2_{destr} ne nécessite pas d'effort supplémentaire en termes de maillage, de génération de table, ou de complexité de mise en œuvre comparativement à une approche TKI-ECFM.
- Le modèle TFM-M2_{destr} répond phénoménologiquement bien. Le facteur d'épaississement est proche de 1.0 durant l'AI, et atteint sa valeur nominale à l'issue d'une durée comparable aux temps physiques de transition AI→déflagration observés dans des conditions similaires.
- Le modèle TFM-M2_{destr} repose sur une résolution directe de la chimie. Or, le nombre important d'espèces/réactions nécessaires à la représentation de phénomènes complexes (AI de flamme froide/chaude, transitions AI→déflagration...) entraîne des coûts de calculs importants dans le cadre d'applications moteur LES 3D.

En résumé, le modèle TFM-M2_{destr} permet la représentation de phénomènes de transition AI→déflagration en configurations moteur 3D LES Dual-Fuel. En outre, TFM-M2_{destr} économise, par rapport à TKI-ECFM, une étape de génération de tables d'AI, longue et fastidieuse dans le cadre d'applications bi-carburant. Toutefois, l'utilisation d'une chimie résolue comportant un grand nombre d'espèces/réactions induit des coûts CPU élevés. L'industrialisation du modèle TFM-M2_{destr} paraît cependant envisageable.

8.5 Perspectives

Ce travail a abouti au développement du modèle TFM-M2_{destr} capable de représenter des phénomènes de transition AI→déflagration dans des configurations Dual-Fuel LES 3D représentatives d'applications industrielles, moyennant un modèle de flamme épaissie et une résolution directe de la chimie (considérée homogène à l'échelle de la cellule). Le modèle a été validé en configurations 1D et 3D académique, et la faisabilité d'un calcul moteur utilisant le modèle TFM-M2_{destr} a été vérifiée. Toutefois, la comparaison numérique/expérimental effectuée dans ce travail se limite à un point de fonctionnement unique. Une validation extensive du modèle TFM-M2_{destr} en termes de prédictivité/robustesse sur les données Dual-Fuel expérimentales acquises par les travaux de Srna [115] paraîtrait pertinente. La validation du modèle TFM-M2_{destr} sur des cas d'applications industrielles semblerait également pertinente au vu du caractère industrialisable de l'approche. À noter qu'une étape de validation plus extensive du modèle TFM-M2_{destr}, en contexte industriel, fait l'objet d'un sujet de thèse reprenant ce travail.

Cependant, une approche de type TFM reposant sur la résolution directe d'une chimie relativement lourde (tout du moins d'un point de vue d'application industrielle) implique des temps de calculs largement supérieurs à une approche tabulée comme TKI-ECFM. Les schémas analytiquement réduits (ARC) montrent un potentiel intéressant en configurations DNS mono-carburant [14, 117, 130] et bi-carburant [49, 112], ou dans la cadre d'applications LES [66, 107, 108], puisqu'ils permettent une réduction significative du nombre d'espèces transportées (de l'ordre de 30 espèces) et donc du temps de calcul, tout en reproduisant le comportement des schémas détaillés desquels ils sont dérivés. Ainsi, le coût d'un calcul TFM-M2_{destr}-ARC comportant 30 espèces serait probablement atténué d'un facteur 2-3 par rapport à un calcul utilisant un schéma réduit "classique" tel que celui de Yao et al. [128] (54 espèces) employé dans ce travail. Le coût d'un calcul TFM-M2_{destr}-ARC resterait toutefois probablement supérieur à celui d'un calcul TKI-ECFM (20 espèces + traceurs transportés en configurations Dual-Fuel).

Par ailleurs, ce travail repose sur une hypothèse de chimie homogène, et considère l'influence des gradients de sous-maille négligeable. Or, les travaux de Tillou [120] ont notamment montré que la prise en compte des stratifications non-résolues à travers une PDF de Z pouvait améliorer sensiblement la prédiction du spray Diesel. Une modélisation des stratifications non-résolues par une approche de type RIF, reposant sur une résolution directe la chimie tout comme TFM, paraîtrait alors adaptée. Ce modèle s'appuyant sur la résolution de flammelettes instationnaires prendrait alors notamment en compte les effets de dissipation scalaire affectant l'AI en conditions Dual-Fuel fortement stratifiées. Une approche de type RIF a été utilisée avec succès par Davidovic et al. [29] en LES, sur une configuration Diesel représentative du spray A de l'ECN. Une approche de type CMC permettrait également la prise en compte des stratifications non-résolues. Une modélisation CMC en configuration LES est proposée par Zhang et al. [138] et appliquée avec succès sur un brûleur académique swirlé. Toutefois, les approches RIF et CMC engendrent des coûts de calcul prohibitifs dans le cadre d'applications industrielles, et l'intégration des hétérogénéités de sous-maille et des phénomènes de micro-mélange n'est pas immédiate puisqu'elle requiert en outre des efforts de modélisation conséquents.

En outre, bien que ce travail concerne la transition AI→déflagration en configurations Dual-Fuel, l'approche TFM-M2_{destr} développée ici peut a priori servir de base de développement, dans le cadre d'une modélisation de l'allumage par jet chaud rencontré en moteur à allumage par pré-chambre. Bien que l'allumage des gaz frais dans la chambre soit d'un côté assuré par un spray pilote, de l'autre par un jet de gaz brûlés, les technologies Dual-Fuel et à allumage par pré-chambre présentent des similitudes en terme de phénoménologie, qu'il serait potentiellement possible de traiter par une approche de modélisation commune : TFM-M2_{destr}. L'approche de modélisation TFM-M2_{destr} peut donc potentiellement couvrir des applications autres que le moteur Dual-Fuel, et notamment le moteur à allumage par pré-chambre.

Enfin, d'un point de vue académique, la méthodologie d'étude de la transition AI→déflagration développée ici en conditions laminaires 1D pourrait être ré-utilisée dans un contexte DNS 2D/3D Dual-Fuel, notamment afin d'approfondir et d'étendre l'étude de la transition AI→déflagration à des conditions turbulentes.

TFM-M2_{destr}		TKI-ECFM	
Avantages	Inconvénients	Avantages	Inconvénients
Prise en compte d'effets de dissipation scalaire résolus sur l'AI	Temps CPU élevés liés à une résolution directe de la chimie (nombre d'espèces/réaction élevé)	Temps CPU faibles liés à un nombre d'espèces/réactions faible	Non-prise en compte des effets de dissipation scalaire résolus ou non-résolus (→mauvaise représentation de l'AI en conditions fortement stratifiées)
Dégénère vers la DNS	Intensification des phénomènes de mélange en raison de la sur-diffusivité (→suggère une modélisation visant à en limiter l'influence)		Nécessite la génération d'une table d'AI, étape fastidieuse dans le cadre d'applications bi-carburant

FIGURE 8.1 – Tableau récapitulant les principaux avantages/inconvénients à l'utilisation des modèles TKI-ECFM et TFM-M2_{destr} dans le cadre d'applications LES moteur 3D.



Algorithme 2 : Description algorithmique du modèle TFM de Jaravel [48].

if $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ **then**

$$\dot{\omega}_{\psi} = \dot{\omega}_{\psi}^+|_{flamme} = \frac{\psi_0 - \psi}{\underbrace{\tau_{num}}_{5\Delta_t}} \implies \text{relaxation vers } \psi_0 \text{ sur une dur ee } \tau_{num} \quad (\text{A.1})$$

if $\mathcal{S}_{NF} < 0.05$ **then**

if $T < T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_{\psi} = \dot{\omega}_{\psi}^-|_{GF} = \frac{0 - \psi}{\underbrace{\tau_{cold}}_{\alpha_{cold}\tau_{flamme}}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur une dur ee } \tau_{cold} \text{ c ot e GF} \quad (\text{A.2})$$

if $T > T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_{\psi} = \dot{\omega}_{\psi}^-|_{GB} = \frac{0 - \psi}{\underbrace{\tau_{hot}}_{\alpha_{hot}\tau_{flamme}}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur une dur ee } \tau_{hot} \text{ c ot e GB} \quad (\text{A.3})$$

Algorithme 3 : Description algorithmique du mod ele M1.

if $c > 0.2 - 0.5 - 0.7$ **then**

$$\mathcal{S}_{NF} = \max \left[\min \left(\beta \frac{|\dot{\omega}_k|}{|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}} - 1, 1 \right), 0 \right] \quad (\text{A.4})$$

else

$$\mathcal{S}_{NF} = 0 \quad (\text{A.5})$$

end

Algorithme 4 : Description algorithmique du modèle TFM-M2 (Mode AI).

if $\psi < 1.0$ **and** $\psi_{burntgas} < 0.05$ **then**

$$\beta = \beta_{AI} = 100.0 \quad (\text{A.6})$$

$$\mathcal{S}_{NF} = \max \left[\min \left(\beta_{AI} \frac{|\dot{\omega}_k|}{|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}} - 1, 1 \right), 0 \right] \quad (\text{A.7})$$

if $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ **and** $c > 0.5$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{\psi_0 - \psi}{\psi_0 (\mathcal{R}_{flametime} \times \mathcal{T}_{flamme})} \implies \text{relaxation vers } \psi_0 \text{ sur } \mathcal{T}_{flamme} \quad (\text{A.8})$$

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} = 0 \quad (\text{A.9})$$

end

end

if $\mathcal{S}_{NF} < 0.05$ **then**

if $T < T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{0 - \psi}{\tau_{cold}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{cold} \text{ côté GF} \quad (\text{A.10})$$

end

if $T > T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{0 - \psi}{\tau_{hot}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{hot} \text{ côté GB} \quad (\text{A.11})$$

end

end

if $c < 0.5$ **then**

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} = \frac{0 - \psi_{burntgas}}{\tau_{num}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{cold} \text{ côté GF} \quad (\text{A.12})$$

end

Algorithme 5 : Description algorithmique du modèle TFM-M2_{destr} (Mode AI)

if $\psi < 1.0$ **and** $\psi_{burntgas} < 0.05$ **then**

$$\beta = \beta_{AI} = 100.0 \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{S}_{NF} = \max \left[\min \left(\beta_{AI} \frac{|\dot{\omega}_k|}{|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}} - 1, 1 \right), 0 \right] \quad (\text{A.14})$$

if $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ **and** $c > 0.5$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{\psi_0 - \psi}{\psi_0 (\mathcal{R}_{flametime} \times \mathcal{T}_{flamme})} \implies \text{relaxation vers } \psi_0 \text{ sur } \mathcal{T}_{flamme} \quad (\text{A.15})$$

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} = 0 \quad (\text{A.16})$$

end

end

if $\mathcal{S}_{NF} < 0.05$ **then**

if $T < T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{0 - \psi}{\tau_{hot}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{cold} \text{ côté GF} \quad (\text{A.17})$$

end

if $T > T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = 0 \implies \text{inopérance du terme de relaxation vers } 0 \text{ côté GB} \quad (\text{A.18})$$

end

end

if $c < 0.5$ **then**

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} = \frac{0 - \psi_{burntgas}}{\tau_{num}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{cold} \text{ côté GF} \quad (\text{A.19})$$

end

Algorithme 6 : Description algorithmique du modèle TFM-M2 (Mode déflagration).

if $\psi > 1.0$ **or** $\psi_{burntgas} > 0.05$ **then**

$$\beta = \beta_{deflag} = 4.0 \quad (\text{A.20})$$

$$\mathcal{S}_{NF} = \max \left[\min \left(\beta_{deflag} \frac{|\dot{\omega}_k|}{|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}} - 1, 1 \right), 0 \right] \quad (\text{A.21})$$

if $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ **and** $c > 0.5$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{\psi_0 - \psi}{\tau_{num}} \implies \text{relaxation vers } \psi_0 \text{ sur } \tau_{num} \quad (\text{A.22})$$

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} = \frac{\psi_{0,burntgas} - \psi_{burntgas}}{\tau_{num}} \implies \text{relaxation vers } \psi_{0,burntgas} \text{ sur } \tau_{num} \quad (\text{A.23})$$

end

end

if $\mathcal{S}_{NF} < 0.05$ **then**

if $T < T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{0 - \psi}{\tau_{cold}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{cold} \text{ côté GF} \quad (\text{A.24})$$

end

if $T > T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{0 - \psi}{\tau_{hot}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{hot} \text{ côté GB} \quad (\text{A.25})$$

end

end

if $c < 0.5$ **then**

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} = \frac{0 - \psi_{burntgas}}{\tau_{num}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{cold} \text{ côté GF} \quad (\text{A.26})$$

end

Algorithme 7 : Description algorithmique du modèle TFM-M2_{destr} (Mode déflagration).

if $\psi > 1.0$ **or** $\psi_{burntgas} > 0.05$ **then**

$$\beta = \beta_{deflag} = 4.0 \quad (\text{A.27})$$

$$\mathcal{S}_{NF} = \max \left[\min \left(\beta_{deflag} \frac{|\dot{\omega}_k|}{|\dot{\omega}_k|_{1D}^{max}} - 1, 1 \right), 0 \right] \quad (\text{A.28})$$

if $\mathcal{S}_{NF} > 0.8$ **and** $c > 0.5$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{\psi_0 - \psi}{\tau_{num}} \implies \text{relaxation vers } \psi_0 \text{ sur } \tau_{num} \quad (\text{A.29})$$

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} = \frac{\psi_{0,burntgas} - \psi_{burntgas}}{\tau_{num}} \implies \text{relaxation vers } \psi_{0,burntgas} \text{ sur } \tau_{num} \quad (\text{A.30})$$

end

end

if $\mathcal{S}_{NF} < 0.05$ **then**

if $T < T_{switch}$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{0 - \psi}{\tau_{hot}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{cold} \text{ côté GF} \quad (\text{A.31})$$

end

if $T > T_{switch}$ **and** $\psi_{burntgas} > 0.05$ **then**

$$\dot{\omega}_\psi = \frac{0 - \psi}{\tau_{hot}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{hot} \text{ côté GB} \quad (\text{A.32})$$

end

end

if $c < 0.5$ **then**

$$\dot{\omega}_{\psi_{burntgas}} = \frac{0 - \psi_{burntgas}}{\tau_{num}} \implies \text{relaxation vers } 0 \text{ sur } \tau_{cold} \text{ côté GF} \quad (\text{A.33})$$

end

Bibliographie

- [1] Qsg12 (tier 4 final/stage iv).
<https://www.cummins.com/engines/qsg12-tier-4-finalstage-iv>.
Consulté : 23 Août 2021.
Cité en page 12.
- [2] Volvo trucks thailand launches new dual-fuel fm400 for heavy applications.
<http://www.ngvjournals.com/s1-news/c3-vehicles/volvo-trucks-thailand-launches-new-dual-fuel-fm400-for-heavy-applications>.
Consulté : 23 Août 2021.
Cité en page 12.
- [3] Wärtsilä 31df.
<https://www.wartsila.com/marine/build/engines-and-generating-sets/dual-fuel-engines/wartsila-31df>.
Consulté : 23 Août 2021.
Cité en page 12.
- [4] A. A. Amsden and M. Findley, Kiva-3v : A block-structured kiva program for engines with vertical or canted valves, tech. rep., Lawrence Livermore National Lab.(LLNL), Livermore, CA (United States), 1997.
Cité en page 150.
- [5] A. A. Amsden, P. J. O'Rourke, and T. D. Butler, Kiva-ii : A computer program for chemically reactive flows with sprays, (1989).
Cité en page 153.
- [6] G. Bansal and H. G. Im, Autoignition and front propagation in low temperature combustion engine environments, *Combustion and Flame*, 158 (2011), pp. 2105–2112.
Cité en pages 24, 26, 27 et 30.
- [7] G. Bansal, H. G. Im, and S.-R. Lee, Autoignition of non-premixed n-heptane/air counterflow subjected to unsteady scalar dissipation rate, *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 (2009), pp. 1083–1090.
Cité en pages 79 et 181.
- [8] G. Bansal, A. Mascarenhas, and J. H. Chen, Direct numerical simulations of autoignition in stratified dimethyl-ether (dme)/air turbulent mixtures, *Combustion and Flame*, 162 (2015), pp. 688–702.
Cité en pages 26, 27 et 30.
- [9] L. Bates and D. Bradley, Deflagrative, auto-ignitive, and detonative propagation regimes in engines, *Combustion and Flame*, 175 (2017), pp. 118–122.
Cité en page 17.
- [10] L. Bates, D. Bradley, G. Paczko, and N. Peters, Engine hot spots : Modes of auto-ignition and reaction propagation, *Combustion and Flame*, 166 (2016), pp. 80–85.
Cité en page 17.

- [11] H. Belaid, Étude des Régimes de Combustion dans le Contexte du Fonctionnement Dual-Fuel, PhD thesis, Université d'Orléans, 2015.
Cité en pages [8](#), [10](#), [11](#), [48](#), [49](#) et [51](#).
- [12] A. Bhagatwala, R. Sankaran, S. Kokjohn, and J. H. Chen, Numerical investigation of spontaneous flame propagation under rcci conditions, *Combustion and Flame*, 162 (2015), pp. 3412–3426.
Cité en pages [24](#), [27](#) et [30](#).
- [13] R. J. Blint, The relationship of the laminar flame width to flame speed, *Combustion Science and Technology*, 49 (1986), pp. 79–92.
Cité en page [62](#).
- [14] G. Borghesi, A. Krisman, T. Lu, and J. H. Chen, Direct numerical simulation of a temporally evolving air/n-dodecane jet at low-temperature diesel-relevant conditions, *Combustion and Flame*, 195 (2018), pp. 183–202.
Cité en page [203](#).
- [15] R. Borghi, *On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames*, Springer US, Boston, MA, 1985, pp. 117–138.
Cité en page [36](#).
- [16] D. Bradley, M. Lawes, and K. Liu, Turbulent flame speeds in ducts and the deflagration/detonation transition, *Combustion and Flame*, 154 (2008), pp. 96–108.
Cité en page [85](#).
- [17] D. Bradley, C. Morley, X. J. Gu, and D. R. Emerson, Amplified pressure waves during autoignition : Relevance to cai engines, in *SAE Powertrain & Fluid Systems Conference & Exhibition*, SAE International, oct 2002.
Cité en pages [16](#), [17](#) et [30](#).
- [18] A. Burcat, K. Scheller, and A. Lifshitz, Shock-tube investigation of comparative ignition delay times for c1-c5 alkanes, *Combustion and Flame*, 16 (1971), pp. 29–33.
Cité en pages [6](#) et [7](#).
- [19] T. Butler and P. O'Rourke, A numerical method for two dimensional unsteady reacting flows, *Symposium (International) on Combustion*, 16 (1977), pp. 1503 – 1515.
Cité en page [41](#).
- [20] R. Cabra, J.-Y. Chen, R. Dibble, A. Karpetsis, and R. Barlow, Lifted methane–air jet flames in a vitiated coflow, *Combustion and Flame*, 143 (2005), pp. 491–506.
Cité en page [103](#).
- [21] S. Candel and T. Poinso, Flame stretch and the balance equation for the flame area, *Combustion Science and Technology*, 70 (1990), pp. 1–15.
Cité en pages [37](#) et [39](#).
- [22] F. Charlette, C. Meneveau, and D. Veynante, A power-law flame wrinkling model for les of premixed turbulent combustion - part ii : Dynamic formulation, *Combustion and Flame*, 131 (2002), pp. 181–197.
Cité en pages [42](#), [161](#) et [164](#).
- [23] J. H. Chen, E. R. Hawkes, R. Sankaran, S. D. Mason, and H. G. Im, Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities, *Combustion and Flame*, 145 (2006), pp. 128–144.
Cité en pages [23](#), [24](#) et [30](#).
- [24] D. Clerk, Investigations on gaseous explosions. part ii. explosive reactions considered in reference to internal combustion engines. introductory survey, *Transactions of the Faraday Society*, 22 (1926), p. 338.
Cité en page [4](#).

-
- [25] O. Colin, A. Benkenida, and C. Angelberger, 3d modeling of mixing, ignition and combustion phenomena in highly stratified gasoline engines, *Oil & Gas Science and Technology*, 58 (2003), pp. 47–62.
Cit  en page 37.
- [26] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso, A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion, *Physics of Fluids*, 12 (2000), pp. 1843–1863.
Cit  en page 41.
- [27] O. Colin, A. Pires da Cruz, and S. Jay, Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-d engine calculations, *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 (2005), pp. 2649 – 2656.
Cit  en pages 37 et 45.
- [28] R. N. Dahms, G. A. Paczko, S. A. Skeen, and L. M. Pickett, Understanding the ignition mechanism of high-pressure spray flames, *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 (2016).
Cit  en pages 181 et 182.
- [29] M. Davidovic, T. Falkenstein, M. Bode, L. Cai, S. Kang, J. Hinrichs, and H. Pitsch, Les of n-dodecane spray combustion using a multiple representative interactive flamelets model, *Oil & Gas Science and Technology–Revue d’IFP Energies nouvelles*, 72 (2017), p. 29.
Cit  en pages 46 et 203.
- [30] E. Demosthenous, G. Borghesi, E. Mastorakos, and R. S. Cant, Direct numerical simulations of premixed methane flame initiation by pilot n-heptane spray autoignition, *Combustion and Flame*, 163 (2016), pp. 122–137.
Cit  en page 29.
- [31] P. Domingo, L. Vervisch, and D. Veynante, Large-eddy simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow, *Combustion and Flame*, 152 (2008), pp. 415 – 432.
Cit  en page 45.
- [32] X. Duan, M.-C. Lai, M. Jansons, G. Guo, and J. Liu, A review of controlling strategies of the ignition timing and combustion phase in homogeneous charge compression ignition (hcci) engine, *Fuel*, 285 (2021), p. 119142.
Cit  en page 6.
- [33] F. Duffour, C. Ternel, and A. Pagot, Ifp energies nouvelles approach for dual fuel diesel-gasoline engines, in 10th International Conference on Engines & Vehicles, SAE International, sep 2011.
Cit  en page 9.
- [34] G. D’Errico, T. Lucchini, F. Contino, M. Jangi, and X.-S. Bai, Comparison of well-mixed and multiple representative interactive flamelet approaches for diesel spray combustion modelling, *Combustion Theory and Modelling*, 18 (2014), pp. 65–88.
Cit  en page 46.
- [35] C. Eberle, P. Gerlinger, K. P. Geigle, and M. Aigner, Toward finite-rate chemistry large-eddy simulations of sooting swirl flames, *Combustion Science and Technology*, 190 (2018), pp. 1194–1217.
Cit  en page 46.
- [36] S. M. Gallagher, H. J. Curran, W. K. Metcalfe, D. Healy, J. M. Simmie, and G. Bourque, A rapid compression machine study of the oxidation of propane in the negative temperature coefficient regime, *Combustion and Flame*, 153 (2008), pp. 316–333.
Cit  en page 7.
- [37] K. Gkagkas and R. Lindstedt, Transported pdf modelling with detailed chemistry of pre- and auto-ignition in ch4/air mixtures, *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 (2007), pp. 1559–1566.
Cit  en page 103.

- [38] D. G. Goodwin, R. L. Speth, H. K. Moffat, and B. W. Weber, Cantera : An object-oriented software toolkit for chemical kinetics, thermodynamics, and transport processes. <https://www.cantera.org>, 2018. Version 2.4.0. Cité en pages 55, 56, 57, 59 et 76.
- [39] K. P. Grogan, S. Scott Goldsborough, and M. Ihme, Ignition regimes in rapid compression machines, *Combustion and Flame*, 162 (2015), pp. 3071–3080. Cité en pages 17, 18 et 30.
- [40] X. J. Gu, D. R. Emerson, and D. Bradley, Modes of reaction front propagation from hot spots, *Combustion and Flame*, 133 (2003), pp. 63–74. Cité en page 22.
- [41] M. Halstead, L. Kirsch, and C. Quinn, The autoignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures—fitting of a mathematical model, *Combustion and Flame*, 30 (1977), pp. 45–60. Cité en page 45.
- [42] E. R. Hawkes, R. Sankaran, P. P. Pébay, and J. H. Chen, Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities, *Combustion and Flame*, 145 (2006), pp. 145–159. Cité en pages 23, 24 et 30.
- [43] J. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, vol. 1, J. Heywood, engine, 1st edition ed., 1988. Cité en page 5.
- [44] S. K. Hoekman and C. Robbins, Review of the effects of biodiesel on nox emissions, *Fuel Processing Technology*, 96 (2012), pp. 237–249. Cité en page 5.
- [45] M. Ihme and Y. C. See, Prediction of autoignition in a lifted methane/air flame using an unsteady flamelet/progress variable model, *Combustion and Flame*, 157 (2010), pp. 1850–1862. Cité en page 46.
- [46] H. G. Im, P. Pal, M. S. Wooldridge, and A. B. Mansfield, A regime diagram for autoignition of homogeneous reactant mixtures with turbulent velocity and temperature fluctuations, *Combustion Science and Technology*, 187 (2015), pp. 1263–1275. Cité en pages 18, 19 et 30.
- [47] K. Inagaki, T. Fuyuto, K. Nishikawa, K. Nakakita, and I. Sakata, Dual-fuel pci combustion controlled by in-cylinder stratification of ignitability, in *SAE 2006 World Congress & Exhibition*, SAE International, apr 2006. Cité en page 9.
- [48] T. Jaravel, Prediction of pollutants in gas turbines using large eddy simulation, PhD thesis, Université de Toulouse, 2016. Cité en pages 43, 44, 100, 111, 114, 116, 119, 120, 140, 141, 142, 195, 201 et 205.
- [49] T. Jin, K. H. Luo, X. Wang, K. Luo, and J. Fan, Dynamics of triple-flames in ignition of turbulent dual fuel mixture : A direct numerical simulation study, *Proceedings of the Combustion Institute*, 37 (2019), pp. 4625–4633. Cité en pages 27, 28, 30 et 203.
- [50] H. Kahila, A. Wehrfritz, O. Kaario, and V. Vuorinen, Large-eddy simulation of dual-fuel ignition : Diesel spray injection into a lean methane-air mixture, *Combustion and Flame*, 199 (2019), pp. 131–151. Cité en pages 46 et 74.

-
- [51] G. T. Kalghatgi and D. Bradley, Pre-ignition and ‘super-knock’ in turbo-charged spark-ignition engines, *International Journal of Engine Research*, 13 (2011), pp. 399–414.
Cité en page 4.
- [52] S. Karimkashi, H. Kahila, O. Kaario, M. Larmi, and V. Vuorinen, A numerical study on combustion mode characterization for locally stratified dual-fuel mixtures, *Combustion and Flame*, 214 (2020), pp. 121–135.
Cité en pages 19, 20 et 30.
- [53] A. Y. Klimenko, Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow, *Fluid dynamics*, 25 (1990), pp. 327–334.
Cité en page 46.
- [54] V. Knop and S. Jay, Latest developments in gasoline auto-ignition modelling applied to an optical cai (tm) engine, *Oil & Gas Science and Technology*, 61 (2006), pp. 121–137.
Cité en page 45.
- [55] T. Korakianitis, A. M. Namasivayam, and R. J. Crookes, Natural-gas fueled spark-ignition (si) and compression-ignition (ci) engine performance and emissions, *Progress in Energy and Combustion Science*, 37 (2011), pp. 89–112.
Cité en page 8.
- [56] G. 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, PhD thesis, Rouen, INSA, 2010.
Cité en page 47.
- [57] J. Lee, S. Lee, C. Kim, and S. Lee, Characteristic of energy fractions and emissions under natural gas/diesel dual-fuel heavy-duty engine in terms of the combustion parameters, *International Journal of Automotive Technology*, 21 (2020), pp. 103–113.
Cité en page 8.
- [58] M. Leguille, Investigating knock in an industrial spark-ignition engine by Large-Eddy Simulation, PhD thesis, Paris, Université Paris-Saclay, 2018.
Cité en pages 33, 37 et 47.
- [59] J. Liu, F. Yang, H. Wang, M. Ouyang, and S. Hao, Effects of pilot fuel quantity on the emissions characteristics of a cng/diesel dual fuel engine with optimized pilot injection timing, *Applied Energy*, 110 (2013), pp. 201–206.
Cité en page 9.
- [60] S. Liu, J. C. Hewson, J. H. Chen, and H. Pitsch, Effects of strain rate on high-pressure nonpremixed n-heptane autoignition in counterflow, *Combustion and Flame*, 137 (2004), pp. 320–339.
Cité en pages 79 et 181.
- [61] T. Lu and C. K. Law, A criterion based on computational singular perturbation for the identification of quasi steady state species : A reduced mechanism for methane oxidation with no chemistry, *Combustion and Flame*, 154 (2008), pp. 761–774.
Cité en page 55.
- [62] M. B. Luong, R. Sankaran, G. H. Yu, S. H. Chung, and C. S. Yoo, On the effect of injection timing on the ignition of lean prf/air/egr mixtures under direct dual fuel stratification conditions, *Combustion and Flame*, 183 (2017), pp. 309–321.
Cité en pages 24, 26, 27 et 30.
- [63] M. B. Luong, G. H. Yu, S. H. Chung, and C. S. Yoo, Ignition of a lean prf/air mixture under rcci/scci conditions : A comparative dns study, *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 (2017), pp. 3623–3631.

- Cité en pages [24](#), [26](#), [27](#), [28](#) et [30](#).
- [64] M. B. Luong, G. H. Yu, T. Lu, S. H. Chung, and C. S. Yoo, Direct numerical simulations of ignition of a lean n-heptane/air mixture with temperature and composition inhomogeneities relevant to hcci and scci combustion, *Combustion and Flame*, 162 (2015), pp. 4566–4585.
Cité en pages [25](#), [26](#), [27](#) et [30](#).
- [65] U. Maas and S. Pope, Simplifying chemical kinetics : Intrinsic low-dimensional manifolds in composition space, *Combustion and Flame*, 88 (1992), pp. 239 – 264.
Cité en page [45](#).
- [66] Q. Malé, Étude numérique de l’allumage par préchambre dans les moteurs à combustion interne, PhD thesis, Toulouse, INPT, 2020.
Cité en pages [103](#), [195](#) et [203](#).
- [67] A. B. Mansfield and M. S. Wooldridge, High-pressure low-temperature ignition behavior of syngas mixtures, *Combustion and Flame*, 161 (2014), pp. 2242–2251.
Cité en page [19](#).
- [68] E. Mastorakos, T. Baritaud, and T. Poinsot, Numerical simulations of autoignition in turbulent mixing flows, *Combustion and Flame*, 109 (1997), pp. 198–223.
Cité en pages [79](#) et [181](#).
- [69] M. Metghalchi and J. C. Keck, Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane, and indolene at high pressure and temperature, *Combustion and Flame*, 48 (1982), pp. 191 – 210.
Cité en page [40](#).
- [70] J.-B. Michel and O. Colin, A tabulated diffusion flame model applied to diesel engine simulations, *International Journal of Engine Research*, 15 (2014), pp. 346–369.
Cité en page [47](#).
- [71] J.-B. Michel, O. Colin, C. Angelberger, and D. Veynante, Using the tabulated diffusion flamelet model adf-pcm to simulate a lifted methane–air jet flame, *Combustion and Flame*, 156 (2009), pp. 1318 – 1331.
Cité en page [47](#).
- [72] J.-B. Michel, O. Colin, and D. Veynante, Modeling ignition and chemical structure of partially premixed turbulent flames using tabulated chemistry, *Combustion and Flame*, 152 (2008), pp. 80 – 99.
Cité en page [47](#).
- [73] A. Misdariis, Schémas cinétiques réduits et couplage thermique pour les simulations aux grandes échelles du cliquetis dans les moteurs à piston, PhD thesis, Toulouse, INPT, 2015.
Cité en pages [33](#), [41](#), [100](#), [102](#) et [187](#).
- [74] D. T. Montgomery and R. D. Reitz, Six-mode cycle evaluation of the effect of egr and multiple injections on particulate and nox emissions from a d.i. diesel engine, in *SAE Technical Paper Series*, SAE Technical Paper Series, SAE International400 Commonwealth Drive, Warrendale, PA, United States, 1996.
Cité en page [5](#).
- [75] C. Mounaïm-Rousselle, S. Jay, J. Kashdan, C. Ternel, and H. Belaid-Saleh, Numerical and experimental investigation of combustion regimes in a dual fuel engine, in *11th International Conference on Engines & Vehicles*, SAE International, sep 2013.
Cité en pages [49](#) et [50](#).
- [76] S. Mouriaux, Simulation aux grandes échelles de l’allumage par bougie turbulent et de la propagation de la flamme dans les Moteurs à allumage commandé, PhD thesis, Paris, École Centrale Paris, 2016.
Cité en page [187](#).

-
- [77] S. Mukhopadhyay and J. Abraham, Influence of heat release and turbulence on scalar dissipation rate in autoigniting n-heptane/air mixtures, *Combustion and Flame*, 159 (2012), pp. 2883–2895.
Cité en pages [79](#) et [181](#).
- [78] A. M. Namasivayam, R. J. Crookes, T. Korakianitis, and J. Olsen, Assessment of combustion in natural gas dual-fuelled compression ignition engines with dimethyl ether and rapeseed methyl ester pilot ignition, *International Journal of Engine Research*, 10 (2009), pp. 165–174.
Cité en page [9](#).
- [79] F. Nicollet, C. Krüger, J. Schorr, E. Nicoud, O. Colin, C. Angelberger, J. Bode, and B. Böhm, A piv-guided large-eddy simulation of in-cylinder flows, *Oil & Gas Science and Technology*, 72 (2017), p. 28.
Cité en page [33](#).
- [80] E. Nicoud, Quantification de la stabilité de la combustion dans les moteurs essence à injection directe par simulation aux grandes échelles, PhD thesis, Paris, Université Paris-Saclay, 2018.
Cité en page [37](#).
- [81] P. J. O'Rourke and A. A. Amsden, The tab method for numerical calculation of spray droplet breakup, Conference, (1987).
Cité en page [152](#).
- [82] P. Pal, M. Valorani, P. G. Arias, H. G. Im, M. S. Wooldridge, P. P. Ciottoli, and R. M. Galassi, Computational characterization of ignition regimes in a syngas/air mixture with temperature fluctuations, *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 (2017), pp. 3705–3716.
Cité en page [19](#).
- [83] R. Papagiannakis and D. Hountalas, Combustion and exhaust emission characteristics of a dual fuel compression ignition engine operated with pilot diesel fuel and natural gas, *Energy Conversion and Management*, 45 (2004), pp. 2971–2987.
Cité en page [10](#).
- [84] C. Pera, O. Colin, and S. Jay, Development of a fpi detailed chemistry tabulation methodology for internal combustion engines, *Oil & Gas Science and Technology*, 64 (2009), pp. 243–258.
Cité en page [45](#).
- [85] N. Peters, Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, *Progress in Energy and Combustion Science*, 10 (1984), pp. 319 – 339.
Cité en page [46](#).
- [86] N. Peters, The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence, *Journal of Fluid Mechanics*, 384 (1999), p. 107–132.
Cité en page [36](#).
- [87] H. Pitsch and N. Peters, A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects, *Combustion and Flame*, 114 (1998), pp. 26 – 40.
Cité en page [74](#).
- [88] H. Pitsch, Y. P. Wan, and N. Peters, Numerical investigation of soot formation and oxidation under diesel engine conditions, in SAE Technical Paper, SAE International, 10 1995.
Cité en page [46](#).
- [89] T. Poinso and D. Veynante, Theoretical and numerical combustion, vol. 1, T. Poinso, S.l., 3rd edition ed., 2012.
Cité en pages [34](#), [40](#), [57](#) et [58](#).

- [90] E. Ranzi, C. Cavallotti, A. Cuoci, A. Frassoldati, M. Pelucchi, and T. Faravelli, New reaction classes in the kinetic modeling of low temperature oxidation of n-alkanes, *Combustion and Flame*, 162 (2015), pp. 1679–1691.
Cité en pages 74 et 75.
- [91] O. Redlich and J. N. S. Kwong, On the thermodynamics of solutions. v. an equation of state. fugacities of gaseous solutions, *Chemical Reviews*, 44 (1949), pp. 233–244.
Cité en page 151.
- [92] R. Reitz and F. Bracco, Mechanisms of breakup of round liquid jets, *Encyclopedia of Fluid Mechanics*, 3 (1986).
Cité en page 153.
- [93] R. D. Reitz, Combustion and ignition chemistry in internal combustion engines, *International Journal of Engine Research*, 14 (2013), pp. 411–415.
Cité en page 3.
- [94] S. Richard, Simulation aux grandes échelles de la combustion dans les moteurs à allumage commandé, PhD thesis, Paris, École Centrale Paris, 2005.
Cité en pages 37 et 40.
- [95] K. Richards, P. Senecal, and E. Pomraning, Converge cfd.
<https://converge CFD.com/>, 2018.
Version 2.4.
Cité en pages 46, 53 et 88.
- [96] E. Richardson, B. Soriano, Y. Wright, and S. Schlatter, Conditional moment closure and g-equation hybrid modelling for dual-fuel methane/n-heptane combustion, 04 2017.
Cité en page 37.
- [97] A. Robert, Simulation aux grandes échelles des combustions anormales dans les moteurs downsizés à allumage commandé, PhD thesis, Toulouse, INPT, 2015.
Cité en pages 33, 37, 47, 88 et 187.
- [98] A. Robert, S. Richard, O. Colin, and T. Poinsot, Les study of deflagration to detonation mechanisms in a downsized spark ignition engine, *Combustion and Flame*, 162 (2015), pp. 2788–2807.
Cité en page 17.
- [99] R. Sankaran and H. Im, Characteristics of auto-ignition in a stratified iso-octane mixture with exhaust gases under homogeneous charge compression ignition conditions, *Combustion Theory and Modelling*, 9 (2005), pp. 417–432.
Cité en page 181.
- [100] F. Salehi, M. Talei, E. R. Hawkes, A. Bhagatwala, J. H. Chen, C. S. Yoo, and S. Kook, Doubly conditional moment closure modelling for hcci with temperature inhomogeneities, *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 (2017), pp. 3677 – 3685.
Cité en page 46.
- [101] R. Sankaran, H. G. Im, E. R. Hawkes, and J. H. Chen, The effects of non-uniform temperature distribution on the ignition of a lean homogeneous hydrogen–air mixture, *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 (2005), pp. 875–882.
Cité en pages 16, 18, 19, 21, 23, 71 et 72.
- [102] S. Sarathy, C. Westbrook, M. Mehl, W. Pitz, C. Togbe, P. Dagaut, H. Wang, M. Oehlschlaeger, U. Niemann, K. Seshadri, P. Veloo, C. Ji, F. Egolfopoulos, and T. Lu, Comprehensive chemical kinetic modeling of the oxidation of 2-methylalkanes from c7 to c20, *Combustion and Flame*, 158 (2011), pp. 2338–2357.
Cité en page 181.

-
- [103] B. Savard, E. R. Hawkes, K. Aditya, H. Wang, and J. H. Chen, Regimes of premixed turbulent spontaneous ignition and deflagration under gas-turbine reheat combustion conditions, *Combustion and Flame*, 208 (2019), pp. 402–419.
Cité en pages 28, 29 et 30.
- [104] S. Saxena and I. D. Bedoya, Fundamental phenomena affecting low temperature combustion and hcci engines, high load limits and strategies for extending these limits, *Progress in Energy and Combustion Science*, 39 (2013), pp. 457–488.
Cité en page 6.
- [105] S. Schlatter, B. Schneider, Y. M. Wright, and K. Boulouchos, Comparative study of ignition systems for lean burn gas engines in an optically accessible rapid compression expansion machine, in 11th International Conference on Engines & Vehicles, SAE International, sep 2013.
Cité en page 8.
- [106] T. Schönfeld and M. Rudgyard, Steady and unsteady flow simulations using the hybrid flow solver avbp, *AIAA Journal*, 37 (1999), pp. 1378–1385.
Cité en page 53.
- [107] O. Schulz, T. Jaravel, T. Poinso, B. Cuenot, and N. Noiray, A criterion to distinguish autoignition and propagation applied to a lifted methane–air jet flame, *Proceedings of the Combustion Institute*, 36 (2017), pp. 1637–1644.
Cité en pages 103, 104 et 203.
- [108] O. Schulz and N. Noiray, Autoignition flame dynamics in sequential combustors, *Combustion and Flame*, 192 (2018), pp. 86–100.
Cité en pages 103, 104 et 203.
- [109] J. Seume and R. Mailach, *Grundlagen der Strömungsmaschinen*, 10 2014, pp. 1250–1277.
Cité en page 147.
- [110] S. Singh, L. Liang, S.-C. Kong, and R. Reitz, Development of a flame propagation model for dual-fuel partially premixed compression ignition engines, *International Journal of Engine Research*, 7 (2006), pp. 65–75.
Cité en page 37.
- [111] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. H. Song, W. C. J. Gardiner, V. V. Lissianski, and Z. W. Qin.
http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 2020.
Cité en pages 55 et 75.
- [112] B. Soriano, Theory and modelling of dual-fuel combustion, PhD thesis, Southampton, University of Southampton, 2019.
Cité en pages 27, 28, 46, 80 et 203.
- [113] B. S. Soriano, E. S. Richardson, S. Schlatter, and Y. M. Wright, Conditional moment closure modelling for dual-fuel combustion engines with pilot-assisted compression ignition, in SAE Technical Paper, SAE International, 10 2017.
Cité en page 37.
- [114] D. Splitter, M. Wissink, D. DelVescovo, and R. D. Reitz, Rcci engine operation towards 60% thermal efficiency, in SAE 2013 World Congress & Exhibition, SAE International, apr 2013.
Cité en page 9.
- [115] A. Srna, Experimental Characterization of Pilot-Fuel Ignition, Combustion, and Soot Formation in Dual-Fuel Combustion Systems, PhD thesis, ETH Zurich, 2018.
Cité en pages 8, 11, 145, 147, 149, 182, 183, 184, 186, 201 et 203.

- [116] C. Strozzi, A. Mura, J. Sotton, and M. Bellenoue, Experimental analysis of propagation regimes during the autoignition of a fully premixed methane–air mixture in the presence of temperature inhomogeneities, *Combustion and Flame*, 159 (2012), pp. 3323–3341.
Cité en pages [21](#), [22](#) et [23](#).
- [117] F. Tagliante, T. Poinso, L. M. Pickett, P. Pepiot, L.-M. Malbec, G. Bruneaux, and C. Angelberger, A conceptual model of the flame stabilization mechanisms for a lifted diesel-type flame based on direct numerical simulation and experiments, *Combustion and Flame*, 201 (2019), pp. 65–77.
Cité en page [203](#).
- [118] B. Tekgül, H. Kahila, O. Kaario, and V. Vuorinen, Large-eddy simulation of dual-fuel spray ignition at different ambient temperatures, *Combustion and Flame*, 215 (2020), pp. 51–65.
Cité en pages [46](#) et [74](#).
- [119] H. Terashima, Y. Hanada, and S. Kawai, A localized thickened flame model for simulations of flame propagation and autoignition under elevated pressure conditions, *Proceedings of the Combustion Institute*, 38 (2021), pp. 2119–2126.
Cité en page [104](#).
- [120] J. Tillou, Développement d’une modélisation basée sur la tabulation de schémas cinétique complexe pour la simulation aux grandes échelles (LES) de l’autoflammation et de la combustion turbulente non-prémélangée dans les moteurs à pistons, PhD thesis, Paris, École Centrale, 2013.
Cité en page [203](#).
- [121] H. Toda, O. Cabrit, G. Balarac, S. Bose, J. Lee, H. Choi, and N. Franck, A subgrid-scale model based on singular values for les in complex geometries, *Proc. Summer Program*, (2010).
Cité en page [154](#).
- [122] D. Veynante and T. Poinso, Reynolds averaged and large eddy simulation modeling for turbulent combustion, in *New Tools in Turbulence Modelling*, O. Métais and J. H. Ferziger, eds., Berlin, Heidelberg, 1997, Springer Berlin Heidelberg, pp. 105–140.
Cité en page [39](#).
- [123] D. Veynante and L. Vervisch, Turbulent combustion modeling, *Progress in Energy and Combustion Science*, 28 (2002), pp. 193–266.
Cité en page [57](#).
- [124] S. Walton, X. He, B. Zigler, M. Wooldridge, and A. Atreya, An experimental investigation of iso-octane ignition phenomena, *Combustion and Flame*, 150 (2007), pp. 246–262.
Cité en page [22](#).
- [125] F. A. Williams, 3. Turbulent Combustion, 1985, pp. 97–131.
Cité en pages [36](#) et [41](#).
- [126] H. Yamashita, M. Shimada, and T. Takeno, A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames, *Symposium (International) on Combustion*, 26 (1996), pp. 27–34.
Cité en page [170](#).
- [127] B. Yang, M. Yao, W. K. Cheng, Y. Li, Z. Zheng, and S. Li, Experimental and numerical study on different dual-fuel combustion modes fuelled with gasoline and diesel, *Applied Energy*, 113 (2014), pp. 722–733.
Cité en pages [9](#) et [10](#).
- [128] T. Yao, Y. Pei, B.-J. Zhong, S. Som, T. Lu, and K. H. Luo, A compact skeletal mechanism for n-dodecane with optimized semi-global low-temperature chemistry for diesel engine simulations, *Fuel*, 191 (2017), pp. 339 – 349.
Cité en pages [74](#), [75](#), [179](#), [181](#), [182](#), [202](#) et [203](#).

-
- [129] C. S. Yoo, T. Lu, J. H. Chen, and C. K. Law, Direct numerical simulations of ignition of a lean n-heptane/air mixture with temperature inhomogeneities at constant volume : Parametric study, *Combustion and Flame*, 158 (2011), pp. 1727–1741.
Cité en pages 25, 26, 27, 28 et 30.
- [130] C. S. Yoo, Z. Luo, T. Lu, H. Kim, and J. H. Chen, A dns study of ignition characteristics of a lean iso-octane/air mixture under hcci and saci conditions, *Proceedings of the Combustion Institute*, 34 (2013), pp. 2985–2993.
Cité en pages 25, 26, 27, 28, 30 et 203.
- [131] A. Yousefi and M. Birouk, Investigation of natural gas energy fraction and injection timing on the performance and emissions of a dual-fuel engine with pre-combustion chamber under low engine load, *Applied Energy*, 189 (2017), pp. 492–505.
Cité en page 8.
- [132] A. Yousefi, H. Guo, and M. Birouk, Effect of diesel injection timing on the combustion of natural gas/diesel dual-fuel engine at low-high load and low-high speed conditions, *Fuel*, 235 (2019), pp. 838–846.
Cité en page 9.
- [133] C. Yu, J. xin Wang, Z. Wang, and S. jin Shuai, Comparative study on gasoline homogeneous charge induced ignition (hcci) by diesel and gasoline/diesel blend fuels (gdbf) combustion, *Fuel*, 106 (2013), pp. 470–477.
Cité en page 9.
- [134] G. H. Yu, M. B. Luong, S. H. Chung, and C. S. Yoo, Ignition characteristics of a temporally evolving n-heptane jet in an iso-octane/air stream under rcci combustion-relevant conditions, *Combustion and Flame*, 208 (2019), pp. 299–312.
Cité en page 24.
- [135] C.-E. Yvonnet, B. Nicolas, F. Dionnet, E. Salaun, J. Apeloig, and F. Grisch, Optical investigation of ignition timing and equivalence ratio in dual-fuel cng/diesel combustion, in *SAE 2016 World Congress and Exhibition*, SAE International, apr 2016.
Cité en page 8.
- [136] Y. Zeldovich, Regime classification of an exothermic reaction with nonuniform initial conditions, *Combustion and Flame*, 39 (1980), pp. 211–214.
Cité en pages 15, 16, 21, 22, 30, 66, 68, 86, 90, 159 et 179.
- [137] F. Zhang, H. Liu, R. Yu, M. Yao, and X. Bai, Direct numerical simulation of h₂/air combustion with composition stratification in a constant volume enclosure relevant to hcci engines, *International Journal of Hydrogen Energy*, 41 (2016), pp. 13758–13770.
Cité en page 27.
- [138] H. Zhang, A. Garmory, D. E. Cavaliere, and E. Mastorakos, Large eddy simulation/conditional moment closure modeling of swirl-stabilized non-premixed flames with local extinction, *Proceedings of the Combustion Institute*, 35 (2015), pp. 1167–1174.
Cité en pages 30 et 203.

