



Etude théorique et numérique de la combustion isochore appliquée au cas du thermoreacteur

Laure Labarrere

► To cite this version:

Laure Labarrere. Etude théorique et numérique de la combustion isochore appliquée au cas du thermoreacteur. Energie électrique. Institut National Polytechnique de Toulouse - INPT, 2016. Français. NNT : 2016INPT0028 . tel-04236943

HAL Id: tel-04236943

<https://theses.hal.science/tel-04236943>

Submitted on 11 Oct 2023

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.



Université
de Toulouse

THÈSE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par :

Institut National Polytechnique de Toulouse (INP Toulouse)

Discipline ou spécialité :

Energétique et Transferts

Présentée et soutenue par :

Mme LAURE LABARRERE

le lundi 21 mars 2016

Titre :

ETUDE THEORIQUE ET NUMERIQUE DE LA COMBUSTION
ISOCHORE APPLIQUEE AU CAS DU THERMOREACTEUR

Ecole doctorale :

Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés (MEGeP)

Unité de recherche :

Centre Européen de Recherche et Formation Avancées en Calcul Scientifique (CERFACS)

Directeur(s) de Thèse :

M. THIERRY POINSOT

M. ANTOINE DAUPTAIN

Rapporteurs :

M. PHILIPPE GUIBERT, UNIVERSITE PARIS 6

M. STÉPHANE JAY, IFPEN

Membre(s) du jury :

M. PHILIPPE GUIBERT, UNIVERSITE PARIS 6, Président

M. ANTOINE DAUPTAIN, CERFACS, Membre

M. MARC BELLENOUE, UNIVERSITE D'ORLEANS, Membre

M. PASCAL BRUEL, UNIVERSITE DE PAU ET DES PAYS DE L ADOUR, Membre

M. THIERRY POINSOT, INP TOULOUSE, Membre

Remerciements

Je souhaite tout d’abord remercier la DGA qui m’a accordé une bourse de financement, ainsi que les entreprises Comat Aerospace et Safran Turbomeca qui, par leur collaboration avec le CERFACS, ont rendu cette thèse possible.

Je tiens à remercier particulièrement Luc Herrero et Michel Aguilar pour la confiance qu’ils m’ont accordée ainsi que pour l’appui et le soutien dont j’ai pu bénéficier tout au long de cette thèse. J’espère très sincèrement que nos routes se recroiseront, tant professionnellement que personnellement.

Je tiens à remercier sincèrement les membres du Jury qui ont accepté de lire et de juger mon travail. Merci donc à Philippe Guibert et Stéphane Jay, qui m’ont fait part de leurs critiques, questions et remarques sur l’ensemble de mes travaux. Marc Bellenoue et Pascal Bruel ont également participé à la discussion qui a contribué à élargir un peu plus ma vision et mes idées sur ces trois années de thèse.

Un grand merci à l’institut Pprime, Marc Bellenoue, Bastien Boust et Stéphane Lamory, pour nous avoir tout d’abord accueilli dans vos locaux à Poitiers, et pour nous avoir fourni des résultats expérimentaux précieux pour l’avancement de la thèse. Votre collaboration a été extrêmement bénéfique tout au long de la thèse et je vous en remercie sincèrement.

J’en viens maintenant à parler du CERFACS, qui m’a accueilli durant ces trois belles années, et je dois dire que l’environnement de travail y est assez exceptionnel : les thésards et chercheurs collaborent et interagissent dans une ambiance formidable et un dynamisme rare. Je tiens à remercier l’ensemble des seniors du CERFACS qui ont toujours su répondre présent quand je les sollicitais, Gab, Olivier, Florent, Elé, Adrien, Anthony et j’en oublie !

Deux personnes m’ont particulièrement guidé, conseillé et soutenu durant la thèse. Un grand merci donc à mes deux directeurs de thèse, Thierry Poinot et Antoine Dauplain, pour vos remarques, vos idées toujours pertinentes et qui ont évidemment joué un grand rôle dans l’accomplissement de cette thèse. Ce fut un vrai plaisir de travailler à vos côtés et j’ai énormément appris, autant humainement que professionnellement.

Ensuite, au CERFACS, il y a l’équipe CSG, ceux que tu appelles au secours quand ton tensiomètre voit rouge, quand tu hésites entre exploser ton clavier ou balancer tout simplement ton mac par la fenêtre... Merci donc à Fabrice, Gérard, Patrick, Isabelle et Nicolas, pour leur aide précieuse et leur bonne humeur !

Que serait le CERFACS sans les rires détonants (mais au combien précieux !) de Chantal et Michèle ? Vos sourires et votre bonne humeur sans faille sont précieux et me manquent déjà, même en période de rédaction finale, vous arrivez à nous faire rire, vraiment merci d’avoir été là. Je remercie aussi Nicole ainsi que ma petite Marie, pour l’ensemble des tâches qu’elles exécutent pour le bon fonctionnement de l’équipe CFD. Marie, merci beaucoup pour ton aide et ton soutien sur la dernière ligne droite, pour

m'avoir gentiment offert ta tasse alors que je venais de casser la mienne le jour de mon anniversaire !

J'en viens à parler de tous les thésards que j'ai pu côtoyer. Les anciens tout d'abord qui m'ont énormément aidé à mes débuts au CERFACS : Rémy (avec son célèbre "Ui Ui"), Anthony (qui vient de devenir Papa, encore félicitations !), Mickael et Lucas (mes compagnons de pelote basque), David (le foufou de la bande), Greg (le chti maintenant exporté à Atlanta), Abdul (Deutsche Qualitat), Yannis (le coach muscu), Jarjar (le redbull man). Merci aussi aux "moins anciens", Adrien B. et Bastien R. (mes compères CVC), Lola (du sapin de Noel aux pâtes bolo, elle a vraiment assuré sur la fin !). Je souhaite maintenant bonne chance à la nouvelle génération de thésards : Laura (l'Aveyron représente !), Félix (la pipelette), Franchine (ton powerpoint restera dans les annales), Majd (mon fréro, el di maria du cerfacs), Romain (el italiano), César (merci pour les dosettes), Mélissa (l'éternelle chouchoute d'Omar), Dario (le véritable italien), Omar (le coach de cross fit), Pierre A. (merci d'avoir animé ma soirée de fin de thèse), Thomas G. (aussi curieux et commère qu'une fille), Luis (le jeune marié de l'équipe), Francis (le réunionnais travailleur), Luc (qui a finalement tenu jusqu'à la fin de la soirée), Romain (Mr Déto).

Je remercie toute mon équipe de hand du HBCQF qui ont finalement retenu le titre de ma thèse...enfin je crois : Boubou ? Grâce à vous, j'ai réussi à tenir jusqu'au bout et je pense que l'équilibre boulot/hand était vital pour moi.

Merci à tous mes amis INSAIENS qui ne pouvaient pas être là le jour de la soutenance mais ont suivi une partie de la présentation depuis la Thaïlande ! J'ai tellement de soirées, WE et voyages à rattraper avec vous, j'espère avoir l'occasion de remédier vite à tout ça !

Une pensée à toutes mes amies du Béarn (Mathilde, Aurélie, Charlotte, Carine, Manolle qui croit toujours que ma thèse consiste à créer une voiture volante), malgré la distance je sais que je peux compter sur vous !

Je voudrais maintenant remercier toute ma famille qui a toujours été présente : j'ai des parents en or (je ne leur dis pas assez), ma soeur jumelle Claire et mon ptit chouchou Paul, vous êtes ce que j'ai de plus cher !

Enfin merci à toi Pierre, pour tout ce que tu as fait au quotidien, tu as été mon rayon de soleil durant ces trois années et tu continues aujourd'hui d'illuminer ma vie.

A mes deux grands-mères,

*'Il y a dans votre regard une lumière particulière qui ne
s'éteindra jamais'*

Table des matières

Chapitre 1: Introduction : la combustion à volume constant

1.1	Une technologie arrivée à maturité / Nécessité d'une rupture technologique	7
1.2	Approche théorique de la combustion isochore	8
1.2.1	Cycle de Brayton	9
1.2.2	Cycle de Humphrey	10
1.2.3	Rendements thermodynamiques	11
1.3	Différentes applications de la combustion isochore	12
1.4	Objectifs et plan de thèse	19

Chapitre 2: Le thermoréacteur testé au laboratoire Pprime

2.1	Lancement du projet	22
2.2	Un concept CVC à cames rotatives	23
2.3	Le premier prototype testé au laboratoire Pprime	25
2.3.1	Description du banc d'essai	25
2.3.2	Carburation du mélange	30
2.3.3	Dispositifs de mesures	30

Chapitre 3: Un outil de simulation 0D pour la combustion isochore : CVC0D

3.1	Grandeurs thermodynamiques pour un écoulement multi-espèces	33
3.2	Equations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs	35
3.3	Hypothèses pour la modélisation 0D d'une chambre CVC	36
3.4	Bilan de masse sur la chambre de combustion	37

3.5 Bilan de carburant sur la chambre de combustion	38
3.6 Bilan d'énergie sur la chambre de combustion	39
3.7 Modélisation des flux d'entrée et de sortie	41
3.7.1 Calcul de la condition critique	41
3.7.2 Expression du nombre de Mach en régime subsonique	42
3.7.3 Expressions du débit massique pour chaque régime de l'écoulement	42
3.7.4 Expression des débits massiques au niveau des systèmes d'admission $\dot{m}_{in}$ et d'échappement $\dot{m}_{out}$ du système étudié	44
3.8 Pertes thermiques	45
3.8.1 Détermination du coefficient de transfert thermique h ($W/m^2/K$)	45
3.8.2 Détermination du nombre de Nusselt Nu par corrélation dans un écoulement turbulent	46
3.9 Modélisation de la combustion	49
3.9.1 Expression du taux de réaction laminaire $\dot{\Omega}_{F,lam}$	49
3.9.2 Modélisation du taux de réaction turbulent $\dot{\Omega}_{F,turb}$ par un modèle de type EBU	51
3.9.3 Modélisation du temps turbulent	52
3.9.4 Transition entre les phases laminaire et turbulente	53

Chapitre 4: Simulation aux grandes échelles en maillage mobile : comparaison des méthodes des frontières immergées (IBC) et de grilles superposées (MISCOG).

4.1 Différentes approches numériques : DNS/LES/RANS	55
4.2 La simulation aux grandes échelles (LES) pour les écoulements réactifs turbulents dans AVBP	57
4.2.1 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes	57
4.2.2 Expression des flux laminares	58
4.2.3 Modélisation des termes de sous maille	58
4.2.4 Modèle de viscosité turbulente : modèle de WALE	60
4.3 Gestion des parties mobiles en rotation	60
4.3.1 La méthode des frontières immergées : IBC (Immersed Boundary Conditions)	60
4.3.2 L'approche MISCOG (Multi Instances Solver Coupled on Overlapping Grids)	62
4.3.3 Comparaison des approches IBC et MISCOG	64

Chapitre 5: Calculs LES 3D non réactifs

5.1	Mise en place du calcul - MISCOG.....	76
5.2	Analyse des cycles à froid obtenus expérimentalement et par la LES.....	81
5.2.1	Moyennes de phase	85
5.3	Détermination des paramètres du modèle 0D	87
5.3.1	Détermination du coefficient de décharge Cd.....	87
5.3.2	Détermination des temps et vitesses caractéristiques pendant la fermeture des soupapes	93
5.4	Comparaison CVC0D avec résultats expérimentaux et LES sur un cas non réactif : OP1	96

Chapitre 6: Calculs LES 3D réactifs

6.1	Modélisation de la combustion turbulente en LES	104
6.1.1	Les régimes de combustion turbulente	104
6.1.2	Les modèles de combustion en LES	107
6.1.3	Le modèle de flamme épaissie TF	107
6.1.4	Le modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente TFLES	109
6.1.5	La fonction d'efficacité de Colin.....	111
6.1.6	Le modèle de flamme épaissie dynamique DTFLES	113
6.2	Cinétique chimique	114
6.3	Modélisation de l'allumage : l'allumage ED	116
6.4	Résultats calculs à chaud : variabilité cycle à cycle.....	118
6.4.1	Analysis of reacting CVC point OP2 (1200 rpm).....	118
6.4.2	Carburation	131
6.4.3	Moyennes de phase.....	133
6.4.4	Analysis of reacting CVC point OP3 (1500 rpm).....	138
6.5	Comparaison CVC0D avec résultats expérimentaux et LES sur un cas réactif : OP2 ...	142

Chapitre 7: Conclusion

Bibliographie

Annexe A : [Equations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs](#)

Annexe B : [Article soumis à *Combustion and Flame*](#)

Certaines parties du manuscrit sont encore formulées en anglais mais elles seront traduites en français dans la version finale. Toutes mes excuses pour ce désagrément lors de votre lecture à venir.

Chapitre 1

Introduction : la combustion à volume constant

Sommaire

1.1	Une technologie arrivée à maturité / Nécessité d'une rupture technologique	7
1.2	Approche théorique de la combustion isochore	8
1.2.1	Cycle de Brayton	9
1.2.2	Cycle de Humphrey	10
1.2.3	Rendements thermodynamiques	11
1.3	Différentes applications de la combustion isochore	12
1.4	Objectifs et plan de thèse	19

1.1 Une technologie arrivée à maturité / Nécessité d'une rupture technologique

Les turbomachines actuelles bénéficient de plus de 60 ans de développement et leur efficacité et leur consommation en carburant n'ont cessé d'augmenter. La propulsion aéronautique est le principal moteur de ces progrès technologiques. Les trois grandes catégories de turbomachines développées dans l'industrie aéronautique sont : les turboréacteurs (le Rafale, Fig. 1.1) très présents dans l'aviation militaire et dans l'aviation civile, les turbopropulseurs qui équipent de nombreux avions de transport régionaux ainsi que certains avions militaires (Airbus 400M, Fig. 1.2) et enfin les turbomoteurs dans le domaine des hélicoptères (Fig. 1.3). Les niveaux de perfectionnement atteints par ces moteurs ont permis la croissance du transport aérien au cours de ces dernières années et le positionnent comme le moyen de transport le plus intéressant en terme de rapidité, de fiabilité et de coût.



FIGURE 1.1 : *Le turboréacteur M88 utilisé dans la propulsion du Rafale.*



FIGURE 1.2 : *Le turbopropulseur TP-400 utilisé dans la propulsion de l'Airbus 400M.*

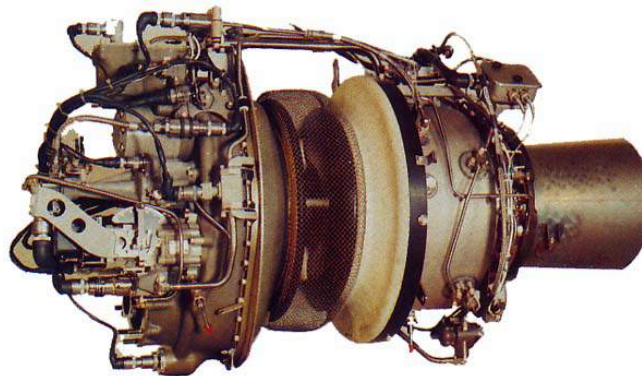


FIGURE 1.3 : *Le turbomoteur MTR390 qui équipe l'hélicoptère militaire le Tigre.*

L'accroissement du nombre d'avions en circulation pose cependant un problème sur le plan environnemental. Les émissions de gaz à effet de serre et l'impact des produits de combustion du kérosène sur la couche d'ozone ont conduit à la création de nouvelles normes environnementales. Les concepts actuels semblent toutefois avoir atteint un plateau en terme d'efficacité, et le gain encore espéré par le développement de ces concepts n'est pas suffisant pour répondre aux exigences de ces contraintes environnementales. Les constructeurs d'avion se tournent ainsi vers de nouvelles technologies.

Afin d'obtenir des gains en consommation dits à deux chiffres, de nouveaux concepts sont ainsi développés, présentant un niveau de consommation en carburant inférieur ainsi que des émissions réduites. **La combustion à volume constant (CVC)** fait partie de ces technologies de rupture qui laissent espérer de tels gains de par son fonctionnement qui repose sur l'exploitation du cycle de Humphrey, plus efficace que celui réalisé par les réacteurs actuels appelé cycle de Brayton.

Hutchins et Metghalchi [1] ont réalisé une analyse thermodynamique des cycles théoriques de Brayton et Humphrey. Dans cette analyse, ils ont comparé l'efficacité énergétique de chaque cycle, en prenant la même chaleur de réaction, le même taux de compression initial et une expansion isentropique des produits de combustion. Leurs résultats suggèrent que l'efficacité du cycle de Humphrey est supérieure à celle du cycle de Brayton pour des taux de compression compris entre 2 et 15 pour des carburants tels que le méthane ou le JP-10. Le gain théorique espéré (de 20 à 35%) est suffisant pour justifier et étudier ces technologies en détail.

Une analyse thermodynamique des cycles théoriques de Brayton et de Humphrey est réalisée dans la Sec. 1.2 afin de comprendre l'intérêt de ces nouveaux cycles à volume constant pour les motoristes.

1.2 Approche théorique de la combustion isochore

Les réacteurs actuels suivent le cycle thermodynamique de Brayton, qui traduit une combustion se déroulant à pression constante. Les concepts de combustion à volume constant reposent sur une physique différente décrite par le cycle thermodynamique de Humphrey. Les cycles théoriques de Brayton et Humphrey sont représentés sur un diagramme PV (Fig. 1.4). Ils se décomposent en quatre étapes :

- une phase de compression adiabatique réversible (1-2).
- une phase de combustion isochore pour le cycle de Humphrey (2-3), combustion isobare pour le cycle de Brayton (2-5).
- une phase de détente : (3-4) pour Humphrey et (5-6) pour Brayton.
- une phase de transformation isobare pour les deux cycles : (4-1) pour Humphrey et (6-1) pour Brayton.

Nous allons analyser chacun des cycles de Brayton et de Humphrey afin de comparer leur rendement thermodynamique global.

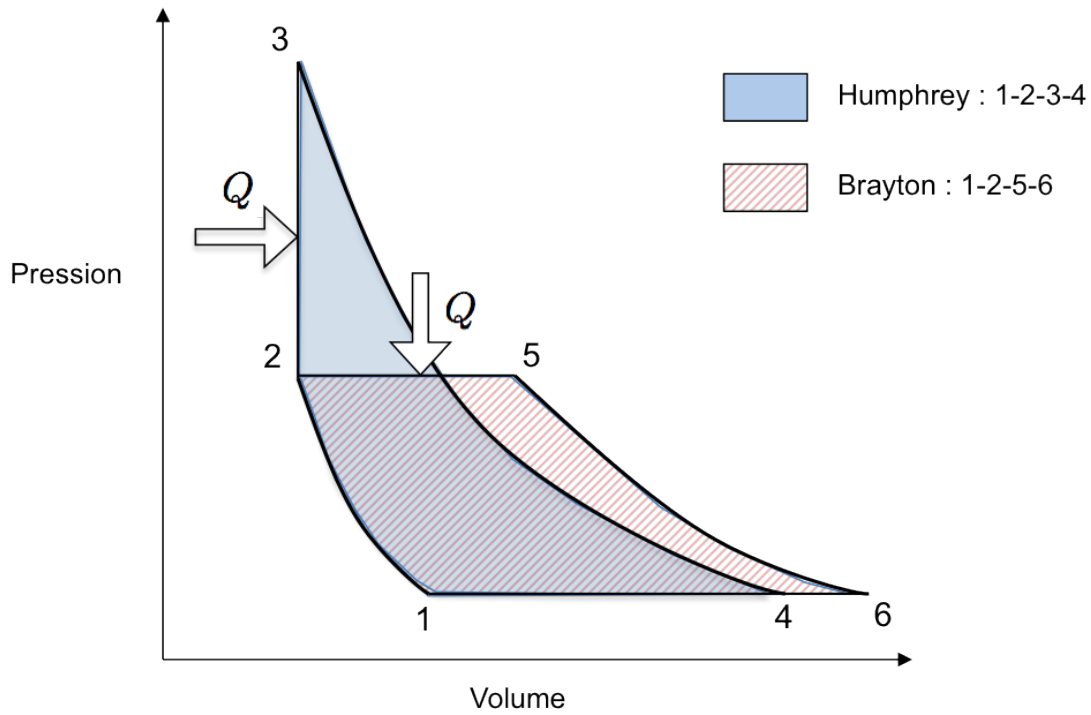


FIGURE 1.4 : Diagramme Pression-Volume des cycles thermodynamiques de Brayton et de Humphrey

1.2.1 Cycle de Brayton

Dans le cycle de Brayton, la combustion se déroule à pression constante (isobare). Pour ce type de transformation thermodynamique, c'est la variation d'enthalpie du système qui est calculée à partir de la loi de Meyer :

$$C_p = \frac{\partial H}{\partial T} \quad (1.1)$$

C_p correspond à la capacité calorifique à pression constante, H est l'enthalpie massique du système et T la température. Un bilan d'énergie réalisé sur le système permet de déterminer les caractéristiques du gaz en fin de combustion (point 5). L'augmentation de température durant la phase de combustion (du point 2 au point 5) dépend de la quantité de chaleur Q fournie au système. Q correspond à l'apport énergétique de carburant. Pour une combustion pauvre, Q dépend de la fraction massique de carburant Y_F et du pouvoir calorifique, noté PCI (pouvoir calorifique inférieur) : $Q = Y_F * PCI$. La température maximale atteinte en fin de combustion T_5 est égale à :

$$T_5 = T_2 + \frac{Q}{C_p} \quad (1.2)$$

$$\text{avec : } C_p = \frac{\gamma r}{\gamma - 1} \quad (1.3)$$

où γ est le rapport des capacités calorifiques à pression constante et à volume constant, r est la constante spécifique du gaz (rapport entre la constante universelle des gaz parfaits $\mathcal{R}$ et la masse molaire du gaz W : $r = \frac{\mathcal{R}}{W}$).

1.2.2 Cycle de Humphrey

Contrairement au cycle de Brayton, la combustion dans le cycle de Humphrey se déroule à volume constant entre les points 2 et 3 (Fig. 1.4). C'est donc la variation d'énergie interne qui est à déterminer pour ce type de transformation thermodynamique :

$$C_v = \frac{\partial U}{\partial T} \quad (1.4)$$

où U est l'énergie interne et C_v la capacité calorifique à volume constant. Un bilan d'énergie sur le système permet de calculer la température de fin de combustion T_3 :

$$T_3 = T_2 + \frac{Q}{C_v} \quad (1.5)$$

$$\text{avec : } C_v = \frac{r}{\gamma - 1} \quad (1.6)$$

La différence entre la capacité calorifique à pression constante C_p et la capacité calorifique à volume constant C_v est liée au travail à fournir aux gaz pour élever leur température. Cette différence est importante dans le cas des gaz. L'air par exemple, à une température de 288 K et une pression de 1 bar, présente une constante spécifique égale à $r = 287 \text{ J/kg/K}$ et un rapport des capacités calorifiques $\gamma = 1.39$. A partir des Eq. 1.3 et 1.6, les capacités calorifiques massiques sont égales à :

— $C_v = 735 \text{ J/kg/K}$,

— $C_p = 1022 \text{ J/kg/K}$.

La capacité calorifique à pression constante est supérieure à la capacité à volume constant d'un rapport γ . La température maximale atteinte dans le cas de la combustion à pression constante (T_5) sera donc inférieure à celle atteinte à volume constant (T_3).

$$\boxed{\begin{matrix} C_p > C_v \\ T_5 < T_3 \end{matrix}} \quad (1.7)$$

1.2.3 Rendements thermodynamiques

Les rendements thermodynamiques des cycles théoriques de Brayton $\eta_{Brayton}$ et de Humphrey $\eta_{Humphrey}$ s'écrivent [2] :

$$\eta_{Brayton} = 1 - \Pi^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} \quad (1.8)$$

$$\eta_{Humphrey} = 1 - \gamma \Pi^{\frac{1-\gamma}{\gamma}} * \frac{(1 + \tilde{q})^{\frac{1}{\gamma}} - 1}{\tilde{q}} \quad \text{avec :} \quad \tilde{q} = \frac{Q}{C_v T_2} \quad (1.9)$$

où Π est le taux de compression des gaz $\Pi = \frac{P_2}{P_1}$ et T_2 la température avant combustion $T_2 = T_1 \Pi^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$ (Fig. 1.4).

Prenons l'exemple d'un mélange méthane-air à la stoechiométrie, dans les conditions de pression et température suivantes : $T_1 = 300\text{K}$ et $P_1 = 1$ bar. Avec un pouvoir calorifique du méthane égal à $PCI_{\text{méthane}} = 50$ MJ/kg et une richesse de 1, on a : $Q = 2.75$ MJ/kg. Le rapport des capacités calorifiques est constant et fixé à $\gamma = 1.3$, la constante spécifique des gaz r est supposée égale à $r = 287$ J/kg/K, ce qui donne : $C_v = 957$ J/kg/K.

La Fig. 1.5 représente le rendement thermodynamique des cycles théoriques de Brayton et de Humphrey pour des taux de compression Π compris entre [2-20].

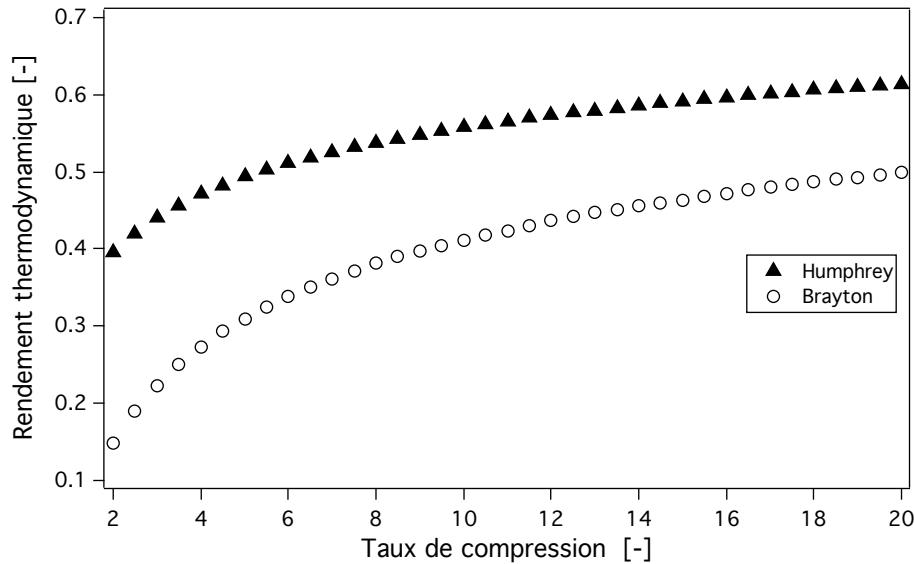


FIGURE 1.5 : Rendement thermodynamique en fonction du taux de compression pour les cycles théoriques de Brayton et Humphrey.

Si l'on prend un taux de compression de $\Pi=10$, les rendements thermodynamiques théoriques des cycles de Brayton et de Humphrey sont égaux à :

$$\eta_{Brayton} = 0.41 \quad (1.10)$$

$$\eta_{Humphrey} = 0.56 \quad (1.11)$$

ce qui montre que le cycle de Humphrey a potentiellement un gain de rendement de l'ordre de 30 % par rapport au cycle de Brayton.

Le rendement du cycle théorique de Humphrey est donc supérieur au rendement du cycle théorique de Brayton. Le principal intérêt de la combustion isochore réside dans ce rendement supérieur. Ainsi, de nombreux industriels se lancent dans le développement de nouveaux concepts capables de réaliser des cycles de combustion isochore. Le motoriste Rolls-Royce a lancé de nombreuses études autour du Wave rotor ces dernières années. Chez General Electric, des groupes de recherche travaillent sur des concepts de détonation pulsée (PDE Pulse Detonation Engine). Ces technologies sont brièvement présentées dans la Sec. 1.3. Le thermoréacteur, concept étudié dans le cadre de cette thèse, est plus particulièrement décrit dans la Sec. 2.2.

1.3 Différentes applications de la combustion isochore

Diverses technologies permettent de mettre en application une combustion à volume constant. Certaines sont basées sur une combustion subsonique (ou déflagration), d'autres font appel à la détonation [3, 4, 2] :

- La déflagration présente des faibles vitesses de flamme, de l'ordre du mètre par seconde : par exemple, la propagation d'une flamme dans un mélange méthane air à la stoechiométrie se fait à 0.36 m/s [5].
- La détonation se caractérise par des vitesses de flamme beaucoup plus importantes, de l'ordre du kilomètre par seconde comme l'avait montré Dixon en 1893 [6], un des premiers à réaliser des mesures expérimentales de vitesses de flamme pour des mélanges H_2-O_2 à la stoechiométrie.

Le développement d'applications CVC est relativement récent, mais, comme le rappelle Bobusch [7], l'idée du concept de combustion isochore remonte au début du XX^{ème} siècle avec l'invention de la turbine à explosion par le Dr Holzwarth (Fig. 1.6). Un peu plus tard, l'intégration de moteurs à pistons dans une turbine à gaz (Fig. 1.7) a conduit à des rendements thermodynamiques intéressants [8]. Les progrès technologiques dans l'industrie automobile ont conduit à des améliorations significatives dans l'efficacité des moteurs Diesel, qui pour rappel, reposent sur une combustion à volume constant (cycle idéal). Mais la complexité et le poids d'une telle turbine combinée à un moteur à pistons et l'arrivée du turboréacteur dans les années cinquante, limitent aujourd'hui son application à des avions légers.

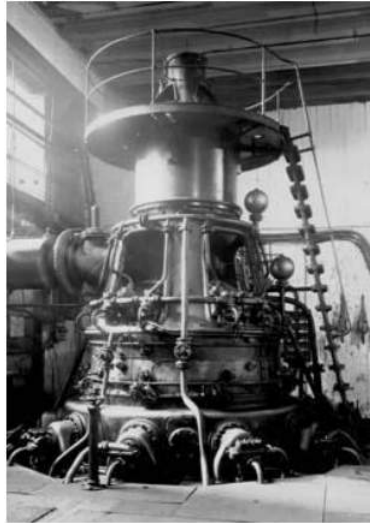


FIGURE 1.6 : Turbine à explosion réalisée en 1914, brevet de l'allemand Holzwarth.

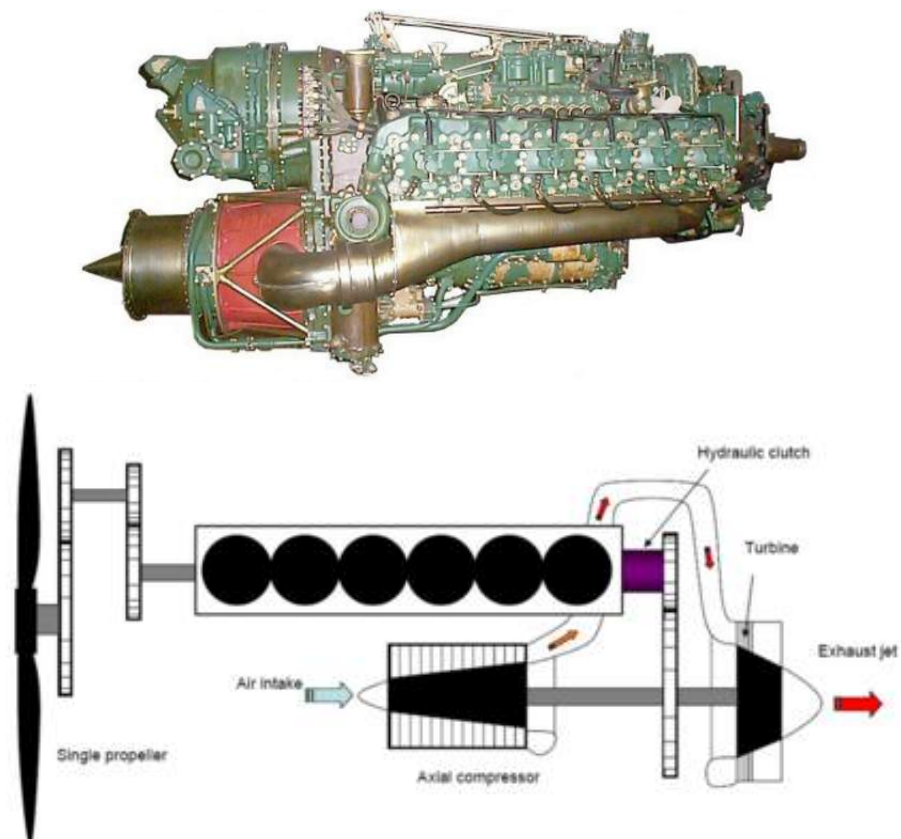


FIGURE 1.7 : Le Napier Nomad II, construit en 1949 par Napier & Son, concept composé d'une turbine alimentée par un moteur diesel à 6 cylindres. Figure du haut : prototype du Nomad II. Figure du bas : schéma de fonctionnement.

- **Pulse Jet Engine**

L'attention des motoristes s'est ensuite tournée vers des chambres de combustion sans pièce mobile [9], de type pulso-réacteur (Figs. 1.8 et 1.9). L'air est mélangé au carburant injecté dans la chambre de combustion ouverte, la combustion du mélange est ensuite initiée lorsque les valves d'admission d'air sont fermées. L'efficacité de ces moteurs est limitée par l'absence de phase de compression en amont de la chambre de combustion (cycle de Lenoir). Des études ont également montré des problématiques de bruit et de vibration excessive [10] de ce type de moteurs, ce qui a finalement borné leur utilisation à la propulsion de missiles.

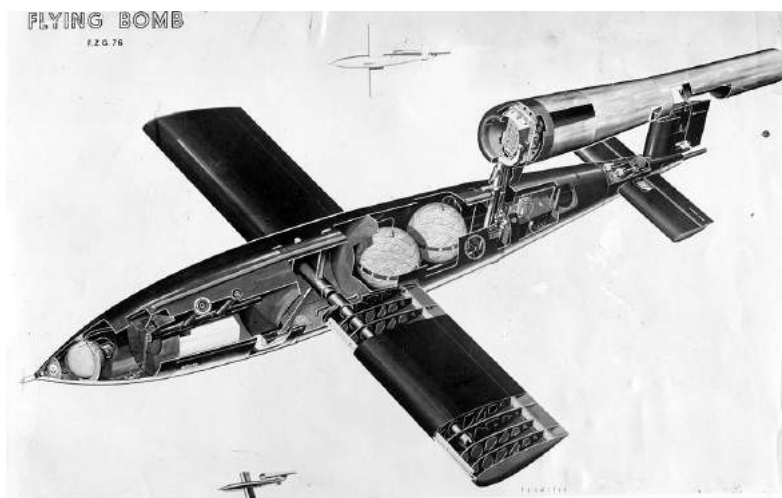


FIGURE 1.8 : Application du pulso-réacteur : propulsion du missile V1 utilisé durant la seconde guerre mondiale.

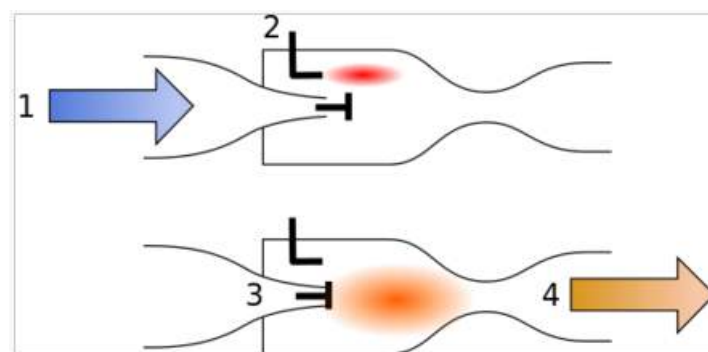


FIGURE 1.9 : Schéma de fonctionnement du pulso-réacteur avec admission de l'air (1), injection du carburant (2), fermeture des valves d'admission et allumage du mélange (3), éjection des gaz brûlés créant la poussée de l'avion (4).

• Pulse Detonation Engine

Contrairement au pulsoréacteur où la combustion est subsonique, le PDE est un concept CVC basé sur la détonation du mélange entre l'air et le carburant. C'est un dispositif capable de produire des ondes de détonation (onde de choc non-stationnaire couplée à un front de réaction). Contrairement à la déflagration qui est caractérisée par une légère chute de pression, la détonation conduit à une augmentation nette de pression à travers le front d'onde [11].

Un PDE est composé d'un tube qui est rempli d'un mélange détonant et est enflammé à une de ses extrémités (Fig. 1.10). Une onde de détonation se développe le long du tube par un processus de DDT : Deflagration Detonation Transition [11]. L'onde sort ensuite du tube par l'extrémité ouverte et les produits de combustion se détendent vers la pression atmosphérique, le tube se vidange puis est rempli à nouveau d'un mélange inflammable, un autre cycle commence.

Des groupes de recherche comme GE Global Research et Air Force Research Laboratory, étudient ce concept de CVC [12, 13]. Les avantages avancés par cette technologie sont la simplicité et l'économie de la partie compresseur, mais la détonation reste un phénomène complexe à maîtriser dans une turbine à gaz.

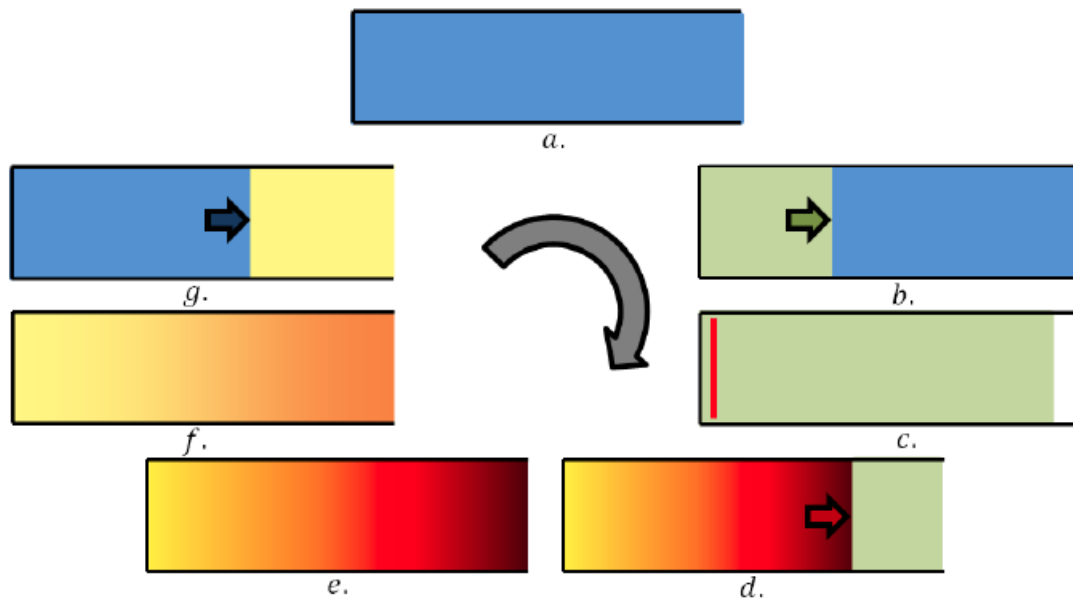


FIGURE 1.10 : Schématisation d'un cycle à détonation pulsée. a Etat initial. b Remplissage avec mélange carburé. c Initiation de l'onde de détonation. d Propagation de l'onde de détonation vers la sortie. e Sortie de la détonation. f Détente isentropique. g Vidange des gaz brûlés.

- **Le Wave rotor**

Le Wave rotor [14, 15, 16] permet également d'atteindre des vitesses de flamme supersoniques et présente l'avantage de pouvoir fonctionner en régime subsonique. Il est composé de canaux répartis autour de l'axe d'un tambour cylindrique tournant entre deux flasques fixes (Fig. 1.11). Ces flasques présentent des orifices qui contrôlent le flux des gaz à travers les canaux. Comme le tambour tourne, les canaux coïncident périodiquement avec les orifices d'entrée et sortie et de ce fait sont exposés à des pressions différentes, ce qui génère des ondes de compression et de détente se propageant à travers les canaux. Le mélange air carburant est allumé lorsque les extrémités du canal sont fermées, la combustion du prémélange se déroule ainsi à volume constant. Le gain de pression obtenu peut théoriquement être extrait de la turbine en aval, et ainsi l'efficacité thermique globale du moteur est augmentée. Pour une description précise du principe de fonctionnement du Wave Rotor, le lecteur peut se référer à [14, 15].

Ce concept principalement étudié à l'université de Purdue aux Etats Unis, est soutenu par le motoriste Rolls-Royce. Différentes configurations de Wave Rotor existent, basées sur de la déflagration ou de la détonation [16]. Les études théoriques, numériques [17, 18, 19] et expérimentales [20] sur le sujet sont nombreuses. La simplicité de cette technologie incite les industriels à l'intégrer dans les systèmes de propulsion déjà existants (entre un compresseur et une turbine), ou dans d'autres applications comme les systèmes de réfrigération [21] ou encore dans l'automobile où il peut être utilisé comme compresseur supplémentaire.



FIGURE 1.11 : Wave rotor étudié à l'université de Purdue [20] - Vue du banc expérimental.

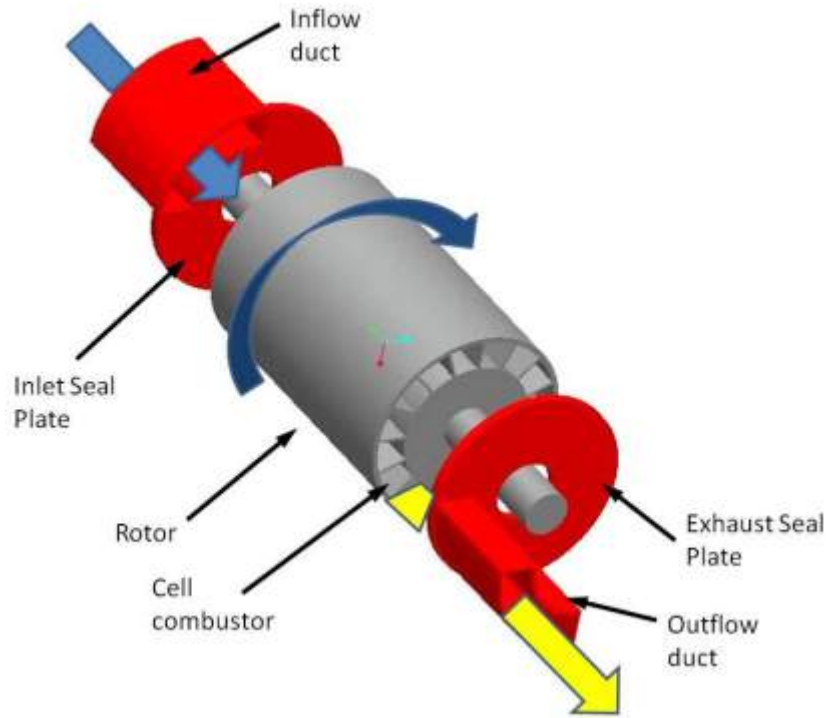


FIGURE 1.12 : Schéma simplifié du fonctionnement du Wave rotor étudié à l'université de Purdue [20]

Le fonctionnement instationnaire de ces concepts de combustion isochore subsonique est comparable à celui de moteurs à pistons. Il est clair que là aussi, la simulation est appelée à prendre une place essentielle dans le design des chambres CVC. Les simulations constituent en elles mêmes des défis scientifiques considérables.

Des études LES récentes [22, 23] ont permis d'identifier certains mécanismes instationnaires et les points clés à maîtriser dans la simulation numérique de ce type de moteurs.

- Tout d'abord, les concepts de CVC subsonique comportent des systèmes d'ouverture et de fermeture (type valves), qui nécessitent des solveurs capables de gérer des parties mobiles en rotation. Les méthodes numériques utilisées dans cette thèse sont présentées et comparées dans le Chap. 4. Sur le plan expérimental, ces obstacles en mouvement nécessitent d'être caractérisés afin d'évaluer les débits d'entrée et de sortie qui contrôlent l'efficacité d'un tel système.

- D'autre part, l'écoulement est fortement instable, avec la succession des phases d'admission à grandes vitesses, de combustion à faibles vitesses et d'échappement des gaz brûlés à hautes températures et grandes vitesses. La phase de combustion est contrôlée par les grandes structures turbulentes de l'écoulement. Cette turbulence créée durant l'admission doit être correctement captée par la méthode numérique utilisée. En ce sens, la simulation aux grandes échelles (LES pour *Large Eddy Simulation*) a fait ses preuves dans le domaine de la combustion turbulente [24, 25, 26, 27, 28].

- Expérimentalement, toutes les difficultés rencontrées dans des moteurs à pistons apparaissent aussi ici : des cycles multiples sont nécessaires pour réaliser des moyennes et analyser les fortes variations cycle à cycle. Des méthodes statistiques sont nécessaires et aucune comparaison directe n'est possible entre des cycles individuels obtenus expérimentalement et numériquement. Le coût CPU explose donc rapidement car, comme observé dans les moteurs à pistons [22, 23, 29, 30], au moins 25 cycles consécutifs doivent être calculés pour pouvoir évaluer un champ moyen et plus de 50 cycles pour obtenir des grandeurs RMS.

- Dans un moteur à piston, la turbulence créée par l'admission des gaz frais est dissipée durant la phase de compression. Dans une chambre de combustion de type CVC, l'absence de compression dans la chambre peut entraîner des difficultés d'allumage si les vitesses résiduelles de l'écoulement sont trop grandes (ou si l'énergie déposée n'est pas suffisante).

La phase d'allumage dans les chambres CVC est également plus critique que dans les turbines à gaz traditionnelles [31, 32], car elle contrôle l'efficacité du moteur : dans le cycle idéal d'Humphrey, la combustion a lieu dans un volume fermé ; en réalité, le phasage des valves d'admission et d'échappement ne permet pas nécessairement une combustion totale de la charge enfermée, laissant ainsi s'échapper des gaz frais. Afin d'optimiser l'efficacité du moteur, l'allumage doit être correctement synchronisé avec les valves mais ne peut avoir lieu trop tard si la combustion doit avoir le temps de se terminer. Tous ces problèmes de phasage sont bien connus dans les moteurs à piston mais doivent être repris de zéro pour une chambre CVC où tous les mécanismes sont différents. En particulier, l'absence de phase de compression et le besoin d'une combustion rapide amènent à allumer un écoulement à forte vitesse, ce qui arrive rarement dans les moteurs à piston.

- Les modèles d'allumage existant dans les codes LES [33, 34, 25, 35] ne permettent pas de décrire la phase plasma qui contrôle l'allumage du mélange : dans la plupart des modèles, cette phase est simplement négligée et remplacée par un dépôt local d'énergie ou par l'introduction d'un noyau de gaz brûlés, à une température arbitraire, au moment où la phase d'allumage est censée être terminée.

- Une autre difficulté est associée à la détermination de l'énergie qui est réellement transmise aux gaz dans l'expérience [36, 37, 38] : les pertes d'énergie sont très importantes et seulement 10 à 30 % de l'énergie de l'étincelle sont en réalité transférés aux gaz, c'est également le cas pour un allumage laser [39]. Cette grande incertitude autour de l'énergie exacte transmise aux gaz rend les comparaisons entre simulations et expériences incertaines.

- La chimie joue un rôle important et nécessite d'être modélisée avec précision afin de prédire correctement la propagation de flamme. Elle doit également pouvoir capter des phases d'autoallumage, de ré-allumage ou encore des phénomènes type *wall quenching* (extinction de la flamme en proche paroi) car une grande partie de la combustion se produit lorsque les flammes sont proches des parois.

- Les pertes de chaleur au niveau des parois de la chambre sont importantes et doivent être correctement modélisées car elles contrôlent le rendement global du moteur. La détermination expérimentale de ces pertes est également difficile car les flux de chaleur mesurés localement

sont instationnaires.

Bien sûr, tous ces phénomènes sont couplés : l'intensité de la turbulence [40] et la performance du système d'allumage au moment de l'étincelle contrôlent la vitesse de combustion et donc l'efficacité du cycle. Dans les moteurs à pistons, les grandes structures turbulentes sont détruites pendant la phase de compression, créant ainsi des structures turbulentes de petite taille qui favorisent l'accélération de flamme. Pour qu'un système CVC soit efficace, la combustion doit être rapide, c'est pourquoi la détonation est souvent préférée.

Dans cette thèse, une chambre CVC subsonique est étudiée, menant à des vitesses de flamme qui sont beaucoup plus petites (quelques mètres par seconde) que les vitesses de détonation (de l'ordre du kilomètre par seconde). Les niveaux de turbulence dans la chambre doivent donc être suffisamment grands pour que la combustion soit rapide. Mais à partir de la fermeture des valves pour la phase de combustion, la turbulence diminue dans la chambre. L'allumage devrait logiquement avoir lieu lorsque la turbulence est maximale, c'est à dire à la fermeture des systèmes d'admission. Mais ceci implique des vitesses locales importantes au niveau de la bougie, ce qui peut conduire à des ratés d'allumage. Ainsi, comme dans un moteur à pistons, le compromis entre tous ces phénomènes est complexe et peut mener à des rendements inférieurs au rendement initial donné par le cycle idéal d'Humphrey.

1.4 Objectifs et plan de thèse

L'objectif de cette thèse est de simuler, grâce à la LES, le fonctionnement multicycles d'un concept de chambre CVC, appelé le thermoréacteur. Ce concept, décrit au Chap. 2, est monté expérimentalement au laboratoire Pprime à Poitiers avec le soutien de la société COMAT et de la DGA. La compréhension des mécanismes contrôlant la combustion dans une chambre CVC passe par plusieurs outils numériques.

- Le premier est un modèle 0D (CVC0D) décrit au Chap. 3. L'objectif est d'identifier les mécanismes importants intervenant au cours du cycle. Pour cela, un outil de simulation 0D a été réalisé traduisant l'évolution d'un cycle moteur de type CVC. Il permet de connaître à chaque instant l'état thermodynamique de la masse gazeuse enfermée et de décrire son évolution au sein de la chambre de combustion.

Cette modélisation 0D est construite à partir des équations de conservation de Navier-Stokes, exprimées pour une phase gazeuse dans le contexte d'écoulements compressibles et réactifs. Des bilans de masse et d'énergie sont réalisés sur la chambre de combustion afin d'exprimer les débits massiques entrant et sortant du système, ainsi que les évolutions de pression et de fraction massique de carburant dans la chambre.

Nous nous focaliserons ensuite sur la modélisation des pertes thermiques, puis sur la partie combustion. Le taux de réaction qui est ici représenté à partir d'un modèle EBU (*Eddy Break-Up*). Ce modèle est compatible avec l'approche 0D mais nécessite des informations fournies par la LES.

- Le second outil numérique est la LES. Nous nous intéressons à cette approche numérique qui semble la plus adaptée pour le calcul du thermoréacteur de par son potentiel à prédire avec plus de précision les écoulements fortement instationnaires dans des géométries complexes. Les équations filtrées de la LES ainsi que les différents modèles utilisés sont rappelés dans un premier temps.

La difficulté pour simuler un système comme le thermoréacteur dans un outil LES se situe dans la gestion des parties tournantes du moteur. Deux méthodes numériques capables de gérer des obstacles en rotation sont étudiées dans cette thèse : la méthode frontières immergées (IBC pour *Immersed Boundary Conditions*) et la méthode MISCOG (*Multi Instances Solver Coupled on Overlapping Grids*). Une comparaison de ces deux méthodes sur un cas d'obstacle bloquant un écoulement dans un canal permet de conclure sur le choix de la méthode la plus adaptée : MISCOG. Le cas du thermoréacteur s'avère être un cas plus complexe que celui des moteurs à piston ou des turbines : en effet, la fermeture complète des valves du thermoréacteur se fait sur une zone extrêmement petite, où la valve tangente les parois de la chambre. Maintenir des fuites négligeables dans ce cas est délicat dans la LES (autant que dans l'expérimentation où des fuites non négligeables doivent être contrôlées).

La mise en place du calcul thermoréacteur avec la méthode MISCOG est décrite dans le Chap. 5. Deux types de calculs sont alors effectués. Tout d'abord, des calculs LES de cycles successifs sans combustion à un régime de 1200 tours/minute : une dizaine de cycles successifs sont calculés avec AVBP et comparés aux résultats expérimentaux en termes de pression au cours du temps. D'autres calculs sont ensuite réalisés pour caler les constantes inconnues du modèle 0D du Chap. 3.

Le Chap. 6 se concentre sur l'analyse de la combustion dans le thermoréacteur. Les modèles de combustion LES utilisés dans ces calculs sont présentés et en particulier le modèle TFLES (*thickened flame*) qui est employé ici dans sa forme standard. Le schéma cinétique à deux étapes pour la combustion iso-octane / air est ensuite décrit ainsi que le modèle d'allumage qui est un élément critique de la LES puisqu'on allume à chaque cycle et que l'on s'attend aussi à voir des ratés d'allumage. Le modèle employé est celui développé par Lacaze et Enaux [33, 22] où la bougie est remplacée par un dépôt d'énergie gaussien en espace et en temps.

Nous nous concentrerons ensuite sur les résultats LES obtenus sur les cycles réactifs. Le premier résultat de cette étude est l'existence de variations cycliques qui dominent le cas réactif dans le thermoréacteur. La combustion est instable dans plusieurs cas d'opération et les expérimentations comme les LES montrent que ces instabilités sont assez fréquentes. La LES est utilisée pour un cas modérément instable à 1200 tours/minute puis pour un cas plus instable à 1500 tours/minute. La confrontation de la LES et des expériences permet de comprendre ces instabilités et de montrer en particulier que les cycles sont liés : un cycle très efficace (grande pression, combustion totale) est souvent suivi d'un cycle inefficace où la combustion se développe mal ou pas du tout. La comparaison entre LES, CVC0D et expérimentation montre aussi que le calcul 0D ne peut être prédictif sans ajustement significatif des modèles de débits et de pertes thermiques.

Chapitre 2

Le thermoréacteur testé au laboratoire Pprime

Sommaire

2.1	Lancement du projet	22
2.2	Un concept CVC à cames rotatives	23
2.3	Le premier prototype testé au laboratoire Pprime	25
2.3.1	Description du banc d'essai	25
2.3.2	Carburant du mélange	30
2.3.3	Dispositifs de mesures	30

2.1 Lancement du projet

En 2010, un consortium (Fig. 2.1) composé de Comat Aerospace, une PME toulousaine, du motoriste Turboméca, et du laboratoire Pprime de Poitiers, lance un programme de recherche RAPID¹ (Régime d'Appui Pour l'Innovation Duale), financé par la DGA (Direction Générale de l'Armement), sur l'étude de la combustion à volume constant appliquée au cas du thermoréacteur. Le thermoréacteur est un concept de combustion isochore inventé et breveté par Michel Aguilar en 2007. Le fonctionnement de ce concept CVC à cames rotatives est détaillé dans la Sec. 2.2.

Comme vu dans la Sec. 1, les moteurs basés sur le cycle de Humphrey affichent des performances extrêmement intéressantes dans un contexte actuel de recherche du meilleur rendement et d'économie d'énergie. Ainsi, le projet RAPID est destiné à mener les activités nécessaires à une meilleure compréhension des mécanismes mis en jeu dans un moteur à combustion isochore. Le premier prototype du thermoréacteur est réalisé (Sec. 2.2), et monté sur banc d'essai au laboratoire Pprime en février 2013 (Sec. 2.3) afin d'étudier le comportement et les performances réelles de ce concept CVC.

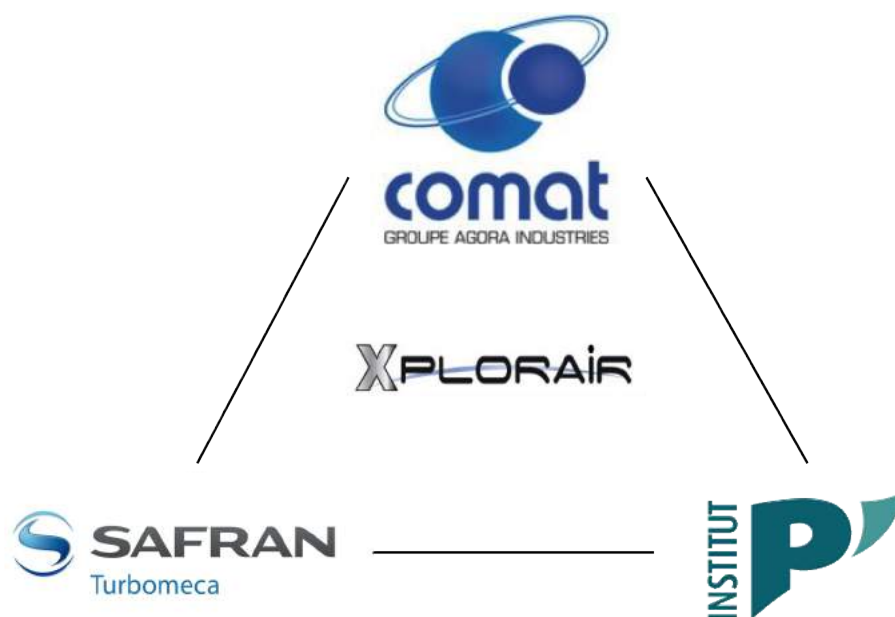


FIGURE 2.1 : Consortium porteur du projet RAPID Thermoreacteur

1. RAPID est un programme qui soutient des projets de recherche industrielle à fort potentiel technologique portés par une PME (Petite et Moyenne Entreprise) et qui présentent des applications militaires mais aussi des retombées pour des marchés civils.

2.2 Un concept CVC à cames rotatives

De manière générale, un cycle CVC peut être divisé en 3 phases : une phase d'admission où les gaz frais entrent dans la chambre de combustion, suivie d'une phase de combustion où les entrées et sorties du système sont fermées, le volume disponible pour les gaz dans la chambre de combustion est alors constant, et enfin une phase d'échappement où les gaz brûlés sont éjectés (Fig. 2.2). Dans le cas du thermoréacteur, des cames rotatives (Fig. 2.2), tournant à la même vitesse, permettent l'enchaînement continu de ces 3 phases (Admission, Combustion et Echappement). La géométrie, le phasage et la vitesse de rotation de ces cames permettent de régler la durée de chaque phase du cycle CVC.



FIGURE 2.2 : Schéma du concept Thermoreacteur (brevet de Michel Aguilar [41])

- Admission

Durant cette phase d'admission, les cames d'admission et d'échappement sont ouvertes simultanément : les gaz frais sont comprimés en amont de la chambre de combustion, les gaz frais entrants chassent les gaz brûlés (résidus du cycle précédent) à travers les cames d'échappement (Fig. 2.3) et la chambre de combustion se remplit alors de gaz frais.

Une partie de gaz frais (et donc de carburant) peut être perdue à l'échappement durant cette phase de balayage, diminuant alors les performances du moteur. D'autre part, des résidus de gaz brûlés peuvent être présents dans la chambre de combustion au moment de l'allumage. Ces grandeurs sont quantifiées et analysées dans la suite de l'étude.

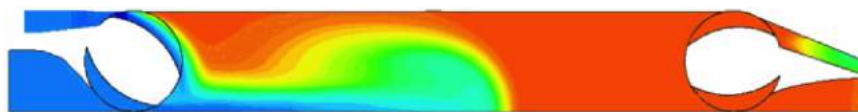


FIGURE 2.3 : Cycle CVC : phase d'admission. Les cames d'admission et d'échappement sont ouvertes.

- Combustion

Durant la phase de combustion (Fig. 2.4), les cames d'admission et d'échappement sont en position fermée. L'énergie nécessaire à l'inflammation du mélange dans la chambre de combustion est apportée par une source extérieure (bougie). Cette phase de combustion est caractérisée par une montée en température, ainsi qu'une montée en pression des gaz, caractéristique d'une combustion à volume constant (Sec. 1). Afin d'obtenir les niveaux de rendement thermodynamique énoncés dans la Sec. 1, la combustion doit avoir lieu à volume constant, elle est donc limitée à la durée de fermeture des cames amont et aval.

La durée de la combustion, qui correspond au temps nécessaire pour brûler toute la charge enfermée dans la chambre de combustion, est une inconnue majeure de l'étude. Elle dépend de nombreux paramètres, et notamment du déroulement de la phase d'allumage. Des études passées ont permis d'analyser l'influence des caractéristiques thermodynamiques de l'écoulement (pression, température, homogénéité du mélange) [42, 43, 39], l'impact du niveau de turbulence [44, 45] ou encore des vitesses résiduelles [46] sur la réussite de l'allumage. Les paramètres géométriques de la chambre [47] ont aussi un effet sur la propagation de la flamme, et donc sur la durée de combustion.



FIGURE 2.4 : Cycle CVC : phase de combustion. Les cames d'admission et d'échappement sont fermées.

- Echappement

L'ouverture des cames d'échappement déclenche l'éjection des gaz brûlés (Fig. 2.5) et donc la fin de la phase de combustion à volume constant. Les gaz se détendent jusqu'à la pression d'échappement. Le cycle suivant débute à l'ouverture des cames d'admission. Afin de récupérer un maximum d'énergie à la sortie du moteur, la détente des gaz doit être totale, comme vu dans l'analyse du diagramme PV dans la Sec. 1.



FIGURE 2.5 : Cycle CVC : phase d'échappement. Seules les cames d'échappement sont ouvertes.

La Sec. 2.3 décrit le prototype du thermoréacteur testé au laboratoire Pprime dans le cadre du projet RAPID, ainsi que les dispositifs de mesure mis en place pour analyser chaque phase du cycle, ainsi que les performances globales du thermoréacteur.

2.3 Le premier prototype testé au laboratoire Pprime

Le premier prototype du thermoréacteur (Figs. 2.6, 2.7 et 2.8) a été monté sur banc d'essai au laboratoire Pprime à Poitiers. Ce laboratoire possède une certaine expérience dans le domaine de la CVC à travers des études en détonation [48, 49]. L'allumage fait également partie de ses axes de recherche [50], et nous verrons dans la Sec. 6.4 que leurs données expérimentales ont notamment permis de valider des résultats numériques sur des conditions critiques d'allumage dans des écoulements à fort gradient de vitesse.

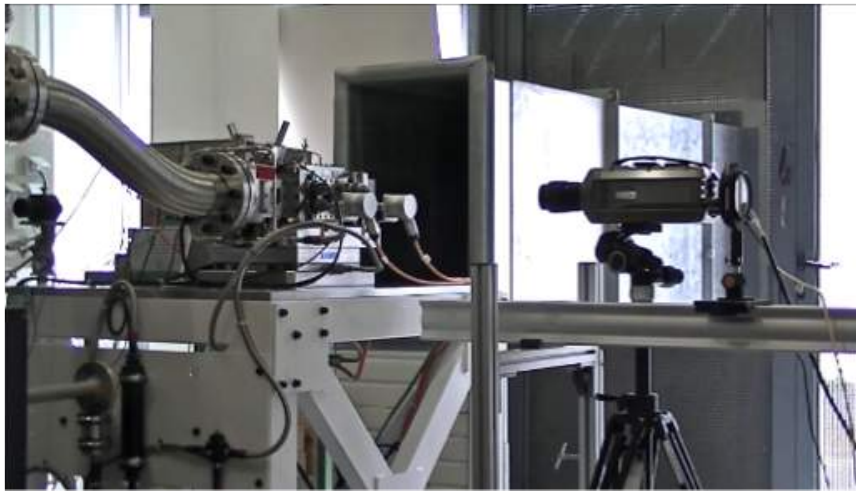


FIGURE 2.6 : Vue du banc expérimental monté au laboratoire Pprime. De la gauche vers la droite : conduit d'admission, thermoréacteur et conduit d'échappement.

2.3.1 Description du banc d'essai

La configuration expérimentale est détaillée sur la Fig. 2.8. Le banc d'essai se compose des éléments suivants :

- un réservoir d'air comprimé,
- un conduit d'admission,
- une chambre de carburation,
- 8 injecteurs automobiles Bosch servant à l'injection du carburant,
- une chambre de combustion,
- un conduit d'échappement pour guider les gaz brûlés à l'extérieur de la pièce.

L'alimentation en air est assurée par un compresseur relié à un réservoir de 65 litres qui permet de stabiliser les conditions en amont de la chambre. Un conduit d'admission de section circulaire relie le réservoir d'air comprimé à la chambre de carburation, qui a une section rectangulaire (Fig. 2.8). Une pièce de raccordement, visible sur la Fig. 2.8, assure la jonction entre le conduit d'admission et la chambre de carburation.



FIGURE 2.7 : Vue d'ensemble du banc thermoréacteur monté au laboratoire Pprime. Vue du réservoir d'air comprimé alimentant le thermoréacteur. L'échappement a lieu à l'air libre vers la cheminée située à droite de l'image.

La chambre de carburation comporte 8 injecteurs automobiles Bosch disposés de façon symétrique (Fig. 2.9) et le carburant (isooctane) est injecté dans la direction du centre de la chambre de carburation. Les détails sur la carburation du mélange sont donnés dans la Sec. 2.3.2. Un disque d'éclatement, visible sur la Fig. 2.8, assure une sécurité en cas de surpression dans la chambre de carburation.

Dans la continuité de la chambre de carburation se trouve le thermoréacteur dont la cylindrée est de 0.78 dm^3 . Les dimensions exactes de la chambre de combustion se trouvent dans la Table 2.1. Une paire de cames, dites d'admission (Fig. 2.10), permet, en position ouverte, l'admission du mélange air-carburant dans la chambre de combustion. Une deuxième paire de cames, dites d'échappement (Fig. 2.11), règle la vidange de la chambre de combustion dans l'atmosphère. Les cames d'admission et d'échappement tournent à la même vitesse et l'entraînement synchronisé des cames se fait par l'intermédiaire d'un moteur électrique et d'une courroie d'entraînement.

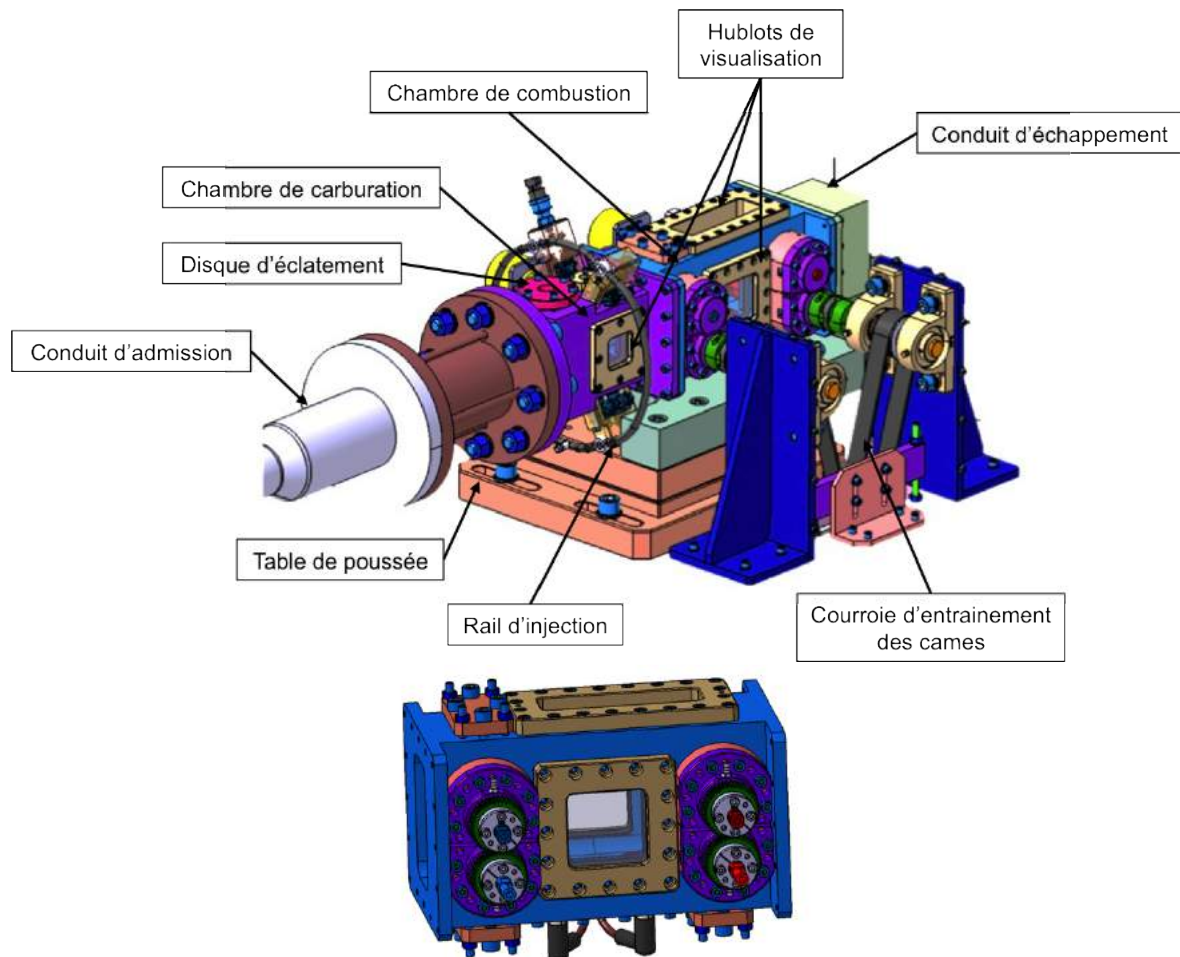


FIGURE 2.8 : Vue CAO du banc d'essai. Haut : Vue globale. Bas : zoom sur la chambre de combustion.

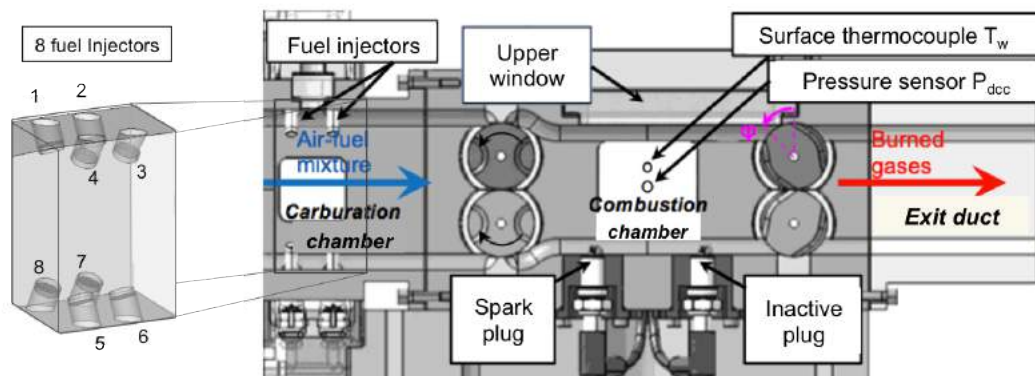


FIGURE 2.9 : Vue de la chambre de carburation, de la chambre de combustion, et du conduit d'échappement à droite. Schéma des 8 injecteurs placés dans la chambre de carburation à gauche.

TABLE 2.1 : Dimensions des différents éléments de l'expérience.

Part	Dimensions	Matériau
Chambre de carburation	Hauteur = 95 mm Largeur = 57 mm Rayon de courbure = 10 mm	304L
Chambre de combustion	Volume = 0.65 L Hauteur = 78 mm Largeur = 57 mm Rayon de courbure = 10 mm Distance entre les centres des cames = 176 mm	304L
Hublot Supérieur	Longueur = 123 mm Largeur = 28 mm	Quartz
Hublot Latéral	Longueur = 61 mm Largeur = 59 mm	Quartz
Cames d'admission	Diamètre = 40 mm, Section maximale = 18 cm ²	304L
Cames d'échappement	Diamètre = 40 mm Section maximale = 13 cm ²	304L
Conduit d'échappement	Hauteur = 78 mm, Largeur = 57 mm Longueur = 100 mm Rayon de courbure = 10 mm	304L

Les cames d'admission (Fig. 2.10) ont une géométrie différente des cames d'échappement (Fig. 2.11) afin d'obtenir les sections de passage données sur la Fig. 2.12. Le phasage des cames (ψ) est défini comme l'écart entre les angles d'ouverture maximum des soupapes d'admission et d'échappement. Il a été choisi de telle manière que les deux paires de cames se ferment simultanément, comme le montre l'évolution des deux lois de sections (admission et échappement) en fonction de l'angle came représentée en Fig. 2.12. Deux cycles Admission-Combustion-Echappement sont réalisés par tour de came, c'est pourquoi l'angle came sur la Fig. 2.12 varie entre 0 et 180°.

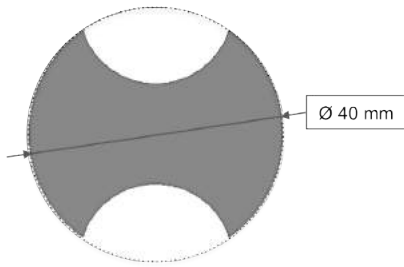


FIGURE 2.10 : Géométrie de la came d'admission

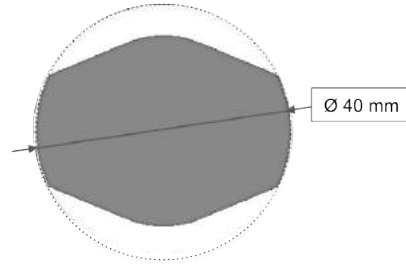


FIGURE 2.11 : Géométrie de la came d'échappement

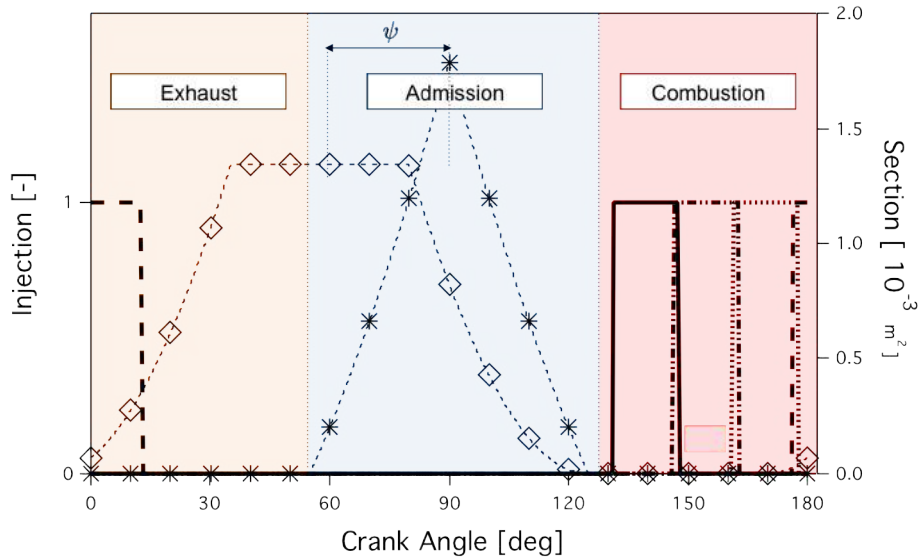


FIGURE 2.12 : Evolution des sections d'admission et d'échappement au cours d'un cycle CVC (Admission-Combustion-Echappement). (*) Section d'admission. ($\diamond$) Section d'échappement. (—) Débit des injecteurs 1 et 2. (-.-.-) Débit des injecteurs 3 et 4. (.....) Débit des injecteurs 5 et 6. (-.-.-) Débit des injecteurs 7 et 8.

2.3.2 Carburation du mélange

Le carburant liquide utilisé est l'isooctane. La carburation du mélange se fait par injection liquide indirecte par l'intermédiaire des 8 injecteurs placés dans la chambre de carburation. Ils fonctionnent par paire. Pour maintenir une pression suffisante dans le rail d'admission du carburant, et donc un débit d'injection approximativement constant pendant la phase d'injection entre 130 deg et 12 deg, chaque injection est déphasée dans le temps comme l'indique la Fig. 2.12. L'injection de carburant est réalisée au moment où les cames d'admission sont fermées (Fig. 2.12), afin d'optimiser le temps d'évaporation des gouttes de carburant avant le début de la combustion. La température du carburant est de 300K.

2.3.3 Dispositifs de mesures

Les dispositifs de mesure disponibles sont listés dans la Table 2.2 :

- mesure du débit en amont du réservoir,
- mesure du flux thermique grâce à un fluxmètre placé sur une paroi latérale de la chambre de combustion,
- des mesures de pression statique sont effectuées dans la chambre de carburation, ainsi qu'à l'intérieur de la chambre de combustion, afin de caractériser la dynamique de l'écoulement en amont de la chambre de combustion. Ces paramètres sont enregistrés grâce à un dispositif d'acquisition haute fréquence (Astromed TMX, 16 bit, 400 kHz),
- la propagation du front de flamme est suivie par chimiluminescence au travers de hublots en saphir, et enregistrée à partir d'une caméra couleur haute fréquence (Phantom v310, 3 kHz, 12 bit).

TABLE 2.2 : *Physical instrumentation of the facility*

Label	Physical diagnostic	Sensor technology	Reference	Uncertainly	Bandwidth
Fair	Air mass flow rate	Coriolis flowmeter	Endress 80F40	0.15%	10 Hz
Tair	Stagnation air temperature	Isolated K-thermocoupler	SS, Ø1.58 mm	1°C	10 Hz
Pair	Stagnation air pressure	Piezoresistive pressure gauge	Druck Unik5000	0.04%	300 Hz
Padm	Absolute pressure in the carburation chamber	Piezoresistive pressure sensor	Kistler 4007B	0.2%	40 kHz
Tp	Wall temperature in the combustion chamber	Isolated K-thermocouple	SS, Ø1.58 mm	1°C	10 Hz
Pcc	Absolute pressure in the combustion chamber	Piezoelectric pressure sensor	Kistler 6125C	1.5%	70 kHz
Tw	Wall heat flux	Surface E-thermocouple	Nanmac E12-3	1°C	100 kHz
θ	Angle of rotary valve	Incremental encoder	Kubler 5823	0.1°	300 kHz

Chapitre 3

Un outil de simulation 0D pour la combustion isochore : CVC0D

Sommaire

3.1	Grandeurs thermodynamiques pour un écoulement multi-espèces	33
3.2	Equations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs	35
3.3	Hypothèses pour la modélisation 0D d'une chambre CVC	36
3.4	Bilan de masse sur la chambre de combustion	37
3.5	Bilan de carburant sur la chambre de combustion	38
3.6	Bilan d'énergie sur la chambre de combustion	39
3.7	Modélisation des flux d'entrée et de sortie	41
3.7.1	<i>Calcul de la condition critique</i>	41
3.7.2	<i>Expression du nombre de Mach en régime subsonique</i>	42
3.7.3	<i>Expressions du débit massique pour chaque régime de l'écoulement</i>	42
3.7.4	<i>Expression des débits massiques au niveau des systèmes d'admission $\dot{m}_{in}$ et d'échappement $\dot{m}_{out}$ du système étudié</i>	44
3.8	Pertes thermiques	45
3.8.1	<i>Détermination du coefficient de transfert thermique h ($W/m^2/K$)</i>	45
3.8.2	<i>Détermination du nombre de Nusselt Nu par corrélation dans un écoulement turbulent</i>	46
3.9	Modélisation de la combustion	49
3.9.1	<i>Expression du taux de réaction laminaire $\dot{\Omega}_{F,lam}$</i>	49
3.9.2	<i>Modélisation du taux de réaction turbulent $\dot{\Omega}_{F,turb}$ par un modèle de type EBU</i>	51
3.9.3	<i>Modélisation du temps turbulent</i>	52
3.9.4	<i>Transition entre les phases laminaire et turbulente</i>	53

Les outils de modélisation 0D sont largement utilisés chez les motoristes car ils fournissent rapidement, et à moindre coût, une évaluation quantitative du comportement thermodynamique du moteur. Les modèles 0D utilisés pour analyser la combustion dans les moteurs automobiles sont nombreux, et s'appuient sur des corrélations expérimentales ou issues de calculs 3D. L'objectif de ce chapitre est de développer un modèle de ce type pour le cas d'une chambre CVC afin de fournir un outil rapide d'analyse des résultats expérimentaux.

Dans le cas de moteurs à combustion isochore comme le thermoréacteur, l'objectif premier de ce chapitre est d'identifier les mécanismes importants intervenant au cours du cycle. Pour cela, une première approche consiste à réaliser un outil de simulation 0D traduisant l'évolution d'un cycle moteur de type CVC. Ce modèle 0D est basé sur des données expérimentales obtenues à Pprime, ainsi que sur des résultats de simulations numériques réalisées durant cette thèse (Chap. 5 et 6).

L'objectif de cet outil de simulation 0D est de connaître à chaque instant l'état thermodynamique de la masse gazeuse enfermée et de décrire son évolution au sein de la chambre de combustion. Cette modélisation 0D est construite à partir de bilans intégraux de masse totale, de masse de carburant et d'énergie.

Ce chapitre est organisé de la façon suivante :

- un rappel des équations de Navier-Stokes compressibles qui gouvernent l'évolution d'un fluide newtonien réactif dans l'approximation des milieux continus est fait dans la Sec. 3.2. L'outil de modélisation 0D proposé dans ce chapitre s'appuie sur des bilans globaux (masse, fraction massique de carburant, énergie) de ces équations de conservation.
- à partir de ces équations et des hypothèses physiques énoncées dans la Sec. 3.3, des bilans de masse (Sec. 3.4) et d'énergie (Sec. 3.6) sont réalisés sur la chambre de combustion afin de déterminer les expressions des débits de gaz entrant et sortant de la chambre (Sec. 3.7).
- cette étape de modélisation 0D permet d'identifier les différents mécanismes à modéliser et de mettre en évidence les paramètres clés de cet outil de simulation 0D, tels que le coefficient de décharge à travers les systèmes d'admission et d'échappement ou encore le coefficient de transfert thermique à travers les parois de la chambre (Sec. 3.8) qui sont des paramètres d'entrée du modèle 0D.
- enfin, nous verrons en détails la modélisation de la partie combustion du système. Cette modélisation est de type EBU (Sec. 3.9), compatible avec le modèle 0D mais nécessitant des informations fournies par la LES.

3.1 Grandeurs thermodynamiques pour un écoulement multi-espèces

Avant d'établir un bilan de masse sur la chambre de combustion, les grandeurs thermodynamiques associées à un écoulement multi-espèces sont tout d'abord rappelées. Un volume de contrôle V est considéré au sein duquel toutes les grandeurs intensives sont uniformes.

La masse de l'espèce k est calculée à partir du nombre de moles de l'espèce k noté n_k , et de sa masse molaire notée W_k :

$$m_k = n_k W_k \quad (3.1)$$

La masse volumique de l'espèce k dans le volume V est :

$$\rho_k = \frac{m_k}{V} \quad (3.2)$$

A partir de la masse de chaque espèce k , la masse totale des N espèces comprises dans le volume V est :

$$m = \sum_{k=1}^N m_k \quad (3.3)$$

De même, la masse volumique du mélange est calculée à partir de la masse volumique de chaque espèce k :

$$\rho = \sum_{k=1}^N \rho_k = \frac{m}{V} \quad (3.4)$$

La fraction massique de l'espèce k est définie par :

$$Y_k = \frac{m_k}{m} = \frac{\rho_k}{\rho} \quad (3.5)$$

A partir de la fraction massique de chaque espèce k , la masse molaire du mélange est égale à :

$$W = \left(\sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \right)^{-1} \quad (3.6)$$

La masse molaire du mélange W permet de déterminer la constante r pour un mélange de gaz parfaits :

$$r = \frac{\mathcal{R}}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (3.7)$$

où $\mathcal{R} = 8.3143 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ est la constante universelle des gaz parfaits.

Les capacités calorifiques C_p et C_v du mélange dépendent des fractions massiques de chaque espèce k :

$$C_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (3.8)$$

$$C_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (3.9)$$

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

3.2 Equations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs

Dans cette section, les équations de Navier-Stokes sont données sans démonstration. Pour plus de précisions, le lecteur pourra se reporter à [51, 52]. En l'absence de forces volumiques externes, le système d'équations de Navier-Stokes pour un écoulement réactif multi-espèces s'écrit de la manière suivante :

— **Conservation de la masse :**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (3.10)$$

— **Conservation de la quantité de mouvement :**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \tau_{ij}) = 0 \quad (3.11)$$

— **Conservation de l'énergie totale :**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j (\rho E + p \delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_i) = \dot{\omega}_T + \dot{Q} \quad (3.12)$$

— **Conservation de l'espèce k :**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k u_i) = \dot{\omega}_k - \frac{\partial}{\partial x_i} J_{j,k} \quad \text{pour } k = 1, N \quad (3.13)$$

où ρ est la densité, u_i représente la $i^{\text{ième}}$ composante de la vitesse, p est la pression, τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses, q_i est le tenseur des flux visqueux, $E = E_i + \frac{1}{2} \mathbf{u} \mathbf{u}$ est l'énergie totale non chimique définie comme la somme de l'énergie sensible et de l'énergie cinétique, $\dot{Q}$ est un terme source énergétique, qui peut être dû par exemple à une bougie, un laser, ou un flux radiatif depuis l'environnement extérieur, $\dot{\omega}_T$ est le terme source chimique. $J_{j,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k , $\dot{\omega}_k$ son taux de production, et Y_k sa fraction massique.

Les lois nécessaires à la fermeture du système d'équations sont détaillées en Annexe.A.

3.3 Hypothèses pour la modélisation 0D d'une chambre CVC

Le système thermoréacteur de la Fig. 2.2 peut être divisé en sous-systèmes comme le montre la Fig. 3.1 : un réservoir amont d'air alimente une chambre de combustion qui communique avec un réservoir aval par l'intermédiaire de systèmes d'admission et d'échappement. Des échanges de masse et d'énergie (Fig. 3.2) ont lieu entre ces différents sous-systèmes au cours d'un cycle moteur CVC. L'objectif est de quantifier ces transferts de masse et d'énergie afin de caractériser, à chaque instant du cycle, l'état thermodynamique du gaz à l'intérieur de la chambre de combustion.

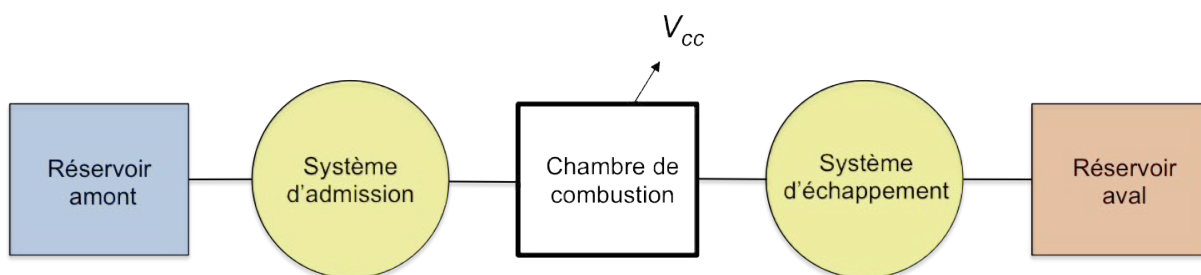


FIGURE 3.1 : Schéma : organisation modèle 0D

Le volume de contrôle V_{cc} considéré par la suite correspond au volume délimité par les parois internes de la chambre de combustion. Les hypothèses suivantes sont faites :

- les gaz mis en jeu sont tous considérés comme des gaz parfaits.
- la température et la pression du gaz dans la chambre de combustion sont uniformes.
- le mélange est homogène : on suppose que le carburant est mélangé instantanément avec l'air et brûle en régime prémélangé laminaire puis turbulent.
- la température des systèmes d'ouverture et fermeture est constante.
- l'écoulement du gaz au travers des systèmes d'ouverture et de fermeture est adiabatique et isentropique.
- le volume occupé par les gaz durant la phase de combustion est constant.

Un bilan de masse sur la chambre de combustion est tout d'abord réalisé dans la Sec. 3.4. La Sec. 3.6 réalise un bilan d'énergie sur la chambre de combustion (V_{cc}), et chaque terme de l'équation est ensuite modélisé : les débits massiques d'admission ($\dot{m}_{in}$) et d'échappement ($\dot{m}_{out}$) sont calculés dans la Sec. 3.7, la Sec. 3.8 modélise les pertes thermiques présentes au niveau des parois de la chambre de combustion (q_{wall}), enfin la Sec. 3.9 s'intéresse à la phase de combustion ($\dot{Q}_T$).

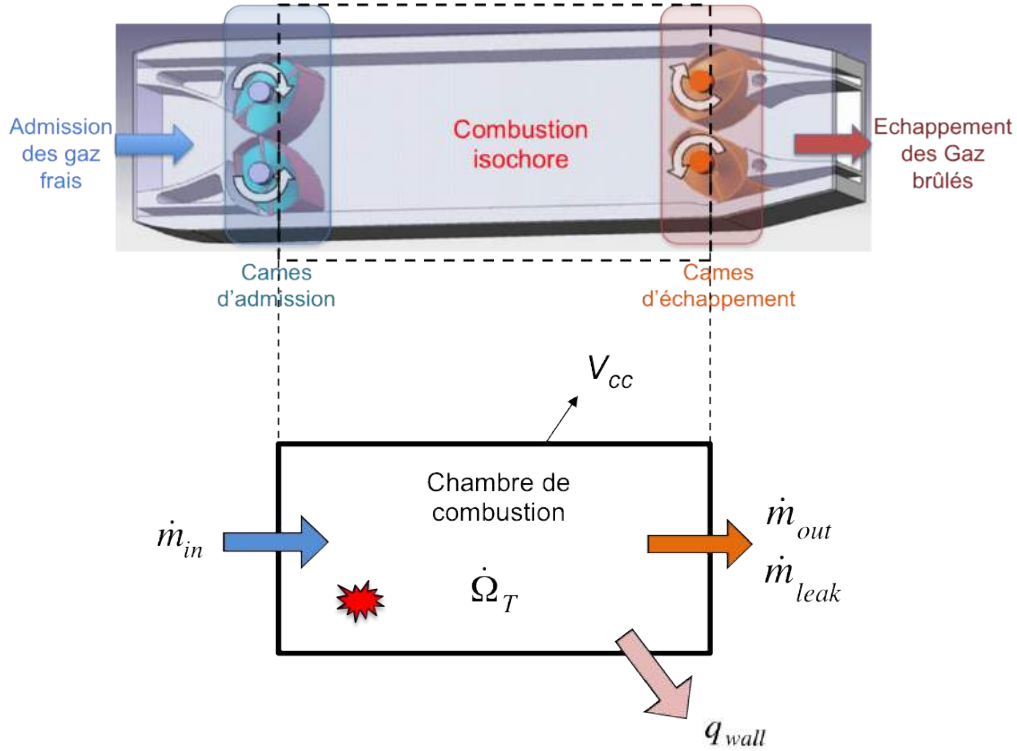


FIGURE 3.2 : Représentation des flux de masse et d'énergie présents au niveau du volume de contrôle V_{cc} . V_{cc} correspond à la chambre de combustion fermée à gauche et à droite par les soupapes.

3.4 Bilan de masse sur la chambre de combustion

Pour construire un modèle 0D de la chambre de combustion, un bilan sur le volume de contrôle V_{cc} (Fig. 3.2) est réalisé à partir de l'équation de conservation de la masse (Eq. 3.10). Un bilan énergétique est ensuite réalisé dans la Sec. 3.6, basé sur l'équation de conservation de l'énergie totale (Eq. 3.12). Pour déterminer l'évolution de la masse de gaz enfermée dans la chambre de combustion, l'Eq. 3.10 est intégrée sur le volume de la chambre V_{cc} :

$$\frac{d}{dt} \int_{V_{cc}} \rho dV + \int_{V_{cc}} (\nabla \cdot \rho \vec{u}) dV = 0 \quad (3.14)$$

$$V_{cc} \frac{d\rho}{dt} + [\rho u S]_{out} - [\rho u S]_{in} = 0 \quad (3.15)$$

L'indice "in" correspond à la partie admission de la chambre et l'indice "out" à la partie échappement. S représente la section de passage du gaz (les lois de sections de passage de chaque came, admission et échappement, sont représentées sur la Fig. 2.12).

Durant la phase de combustion, les cames sont en position fermée, les débits massiques entrant et sortant de la chambre sont nuls. Cependant, il peut y avoir des fuites au niveau des

systèmes d'ouverture ou de fermeture. Il est aussi nécessaire d'introduire un débit de fuite noté $\dot{m}_{leak}$ qui est pris en compte dans le bilan de masse réalisé sur la chambre :

$$\boxed{V_{cc} \frac{d\rho}{dt} = \dot{m}_{in} - \dot{m}_{out} - \dot{m}_{leak}} \quad (3.16)$$

3.5 Bilan de carburant sur la chambre de combustion

La fraction massique de carburant Y_F est déterminée à partir de l'équation de conservation de l'espèce k (Eq. 3.13) :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_k) + \nabla(\rho u_i Y_k) + \nabla(\rho V_k Y_k) = \dot{\omega}_k \quad (3.17)$$

Pour déterminer l'évolution de l'espèce k dans la chambre de combustion, l'Eq. 3.17 est intégrée sur le volume de contrôle V_{cc} . Les flux diffusifs sont nuls sur les parois et négligés en entrée et sortie.

$$\frac{d}{dt} \int^{V_{cc}} (\rho Y_k) dV + \int^{V_{cc}} \nabla(\rho u_i Y_k) dV = \int^{V_{cc}} \dot{\omega}_k dV \quad (3.18)$$

$$V_{cc} \frac{d}{dt}(\rho Y_k) + [\rho u_i Y_k]_{in} - [\rho u_i Y_k]_{out} = \dot{\Omega}_k \quad (3.19)$$

$$V_{cc} \frac{d}{dt}(\rho Y_k) + \dot{m}_{k,in} - \dot{m}_{k,out} = \dot{\Omega}_k \quad (3.20)$$

L'équation finale pour exprimer l'évolution de la fraction massique du carburant Y_F dans la chambre au cours du cycle est :

$$\boxed{V_{cc} \frac{d}{dt}(\rho Y_F) + \dot{m}_{F,in} - \dot{m}_{F,out} = \dot{\Omega}_F} \quad (3.21)$$

où l'indice F correspond au carburant, $\dot{m}_{F,in}$ est le débit massique de carburant entrant, $\dot{m}_{F,out}$ est le débit massique de carburant sortant. $\dot{\Omega}_F$ correspond au taux de réaction intégré sur le volume de la chambre V_{cc} . Le débit de carburant en sortie $\dot{m}_{F,out}$ est calculé à partir de :

$$\dot{m}_{F,out} = Y_{F,out} \dot{m}_{out} \quad (3.22)$$

où $Y_{F,out}$ est supposé être égal à la fraction massique moyenne de carburant dans la chambre Y_F .

3.6 Bilan d'énergie sur la chambre de combustion

L'Eq. 3.12 traduit la conservation de l'énergie totale. L'énergie totale est définie comme la somme de l'énergie sensible et de l'énergie cinétique. L'énergie cinétique est négligée car l'écoulement dans la chambre de combustion est supposé être à l'arrêt (modélisation 0D). Ainsi, l'équation de conservation de l'énergie sensible s'écrit [28] :

$$\rho \frac{De_s}{Dt} = \frac{\partial \rho e_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i e_s) = \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \dot{\omega}_T + \dot{Q} \quad (3.23)$$

$$\text{avec :} \quad \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_{k,i} \right) \quad (3.24)$$

Dans cette modélisation 0D, la diffusion de chaque espèce (V_k est la vitesse de diffusion de l'espèce k) et les contraintes visqueuses sont négligées. De ce fait, le flux d'énergie q_i correspond à une diffusion plus simplement d'énergie, décrite ici par une loi de Fourier ($\lambda \partial T / \partial x_i$). λ est le coefficient de conductivité thermique. D'autre part, l'Eq. 3.23 peut exprimer l'évolution de pression dans le système, car on a supposé préalablement les capacités calorifiques constantes et indépendantes de la température.

$$\rho e_s = \rho \left(h_s - \frac{P}{\gamma} \right) = \frac{P}{\gamma - 1} - \rho C_p T_0 \quad (3.25)$$

où γ est le rapport des capacités calorifiques à pression constante C_p et à volume constant C_v ($\gamma = C_p / C_v$) d'après la loi de Mayer. En intégrant l'Eq. 3.25 dans l'Eq. 3.23, l'équation de pression s'écrit sous la forme :

$$\frac{1}{\gamma - 1} \frac{DP}{Dt} = \frac{-\gamma P}{\gamma - 1} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \dot{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) \quad (3.26)$$

L'intégration de l'Eq. 3.26 sur le volume de la chambre V_{cc} donne :

$$\frac{1}{\gamma - 1} \frac{D}{Dt} \int^{V_{cc}} P dV = \frac{-\gamma P}{\gamma - 1} \int^{V_{cc}} \nabla \cdot \vec{u} dV + \int^{V_{cc}} \dot{\omega}_T dV + \int^{V_{cc}} \nabla (\lambda \nabla T) dV \quad (3.27)$$

$$\frac{V_{cc}}{\gamma - 1} \frac{DP}{Dt} = \frac{\gamma P}{\gamma - 1} (u_{in} S_{in} - u_{out} S_{out}) + \dot{\Omega}_T + hS(T - T_{wall}) \quad (3.28)$$

$$\frac{V_{cc}}{\gamma - 1} \frac{DP}{Dt} = \frac{\gamma P}{\gamma - 1} \left(\frac{\dot{m}_{in}}{\rho_{in}} - \frac{\dot{m}_{out}}{\rho_{out}} \right) + \dot{\Omega}_T + hS(T - T_{wall})$$

$$\frac{V_{cc}}{\gamma - 1} \frac{DP}{Dt} = \underbrace{c_{p,in} T_{in} \dot{m}_{in}}_{\text{Energie masse entrante}} - \underbrace{c_{p,out} T_{out} \dot{m}_{out}}_{\text{Energie masse sortante}} + \underbrace{\dot{\Omega}_T}_{\text{Energie issue de la réaction}} + \underbrace{q_{wall}}_{\text{Pertes thermiques}} \quad (3.29)$$

La valeur de γ utilisée dans l'Eq. 3.29 est supposée constante. Dans CVC0D, la valeur de γ est tabulée en fonction de la température. La Fig. 3.3 représente l'évolution de γ en fonction de la température (entre 250K et 5000K) pour de l'air. Ces tables ont été établies à partir des polynômes référencés et utilisés par le code d'équilibre chimique de la NASA (Chemical Equilibrium with Applications CEA) [53, 54].

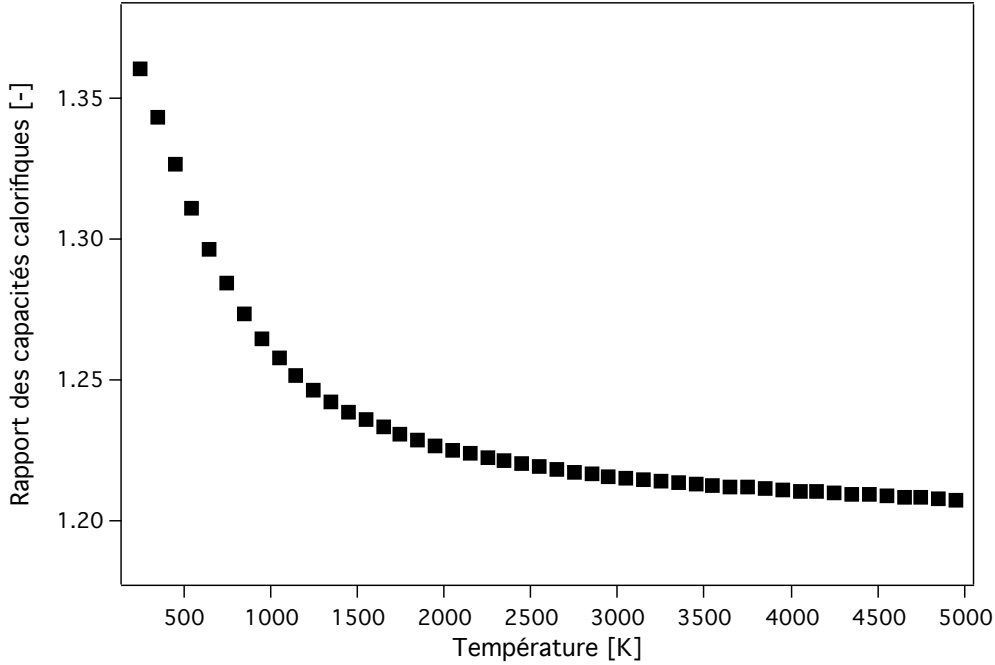


FIGURE 3.3 : Exemple de tabulation de γ : évolution de γ en fonction de la température pour de l'air.

La modélisation des termes de l'Eq. 3.29 est détaillée dans les sections suivantes :

- les débits massiques au niveau de l'entrée $\dot{m}_{in}$ et de la sortie $\dot{m}_{out}$ du système sont exprimés dans la Sec. 3.7,
- la Sec. 3.8 s'intéresse au flux thermique $q_{wall} = hS(T - T_{wall})$ présent au niveau des parois du système,
- le taux de réaction $\dot{\Omega}_T$ est ensuite modélisé dans la Sec. 3.9. En pratique, on supposera la combustion pauvre et on écrira $\dot{\Omega}_T = Q \dot{\Omega}_F$ où $\dot{\Omega}_F$ est le taux de consommation massique du carburant.

3.7 Modélisation des flux d'entrée et de sortie

Dans le cas de concept de CVC subsonique, des systèmes d'ouverture et de fermeture (soupape, came) contrôlent l'admission et l'échappement des gaz de la chambre et ce sont ces sections qui déterminent les débits d'entrée et de sortie, $\dot{m}_{in}$ et $\dot{m}_{out}$, dans la chambre si on admet que c'est dans ces sections que se trouvent les aires de passage minimales. Le calcul des débits massiques entrant $\dot{m}_{in}$ et sortant $\dot{m}_{out}$ se fait au niveau du col des comes (élargissement minimal noté S), à partir des pressions de part et d'autre des rideaux de soupape. Le débit massique s'écrit :

$$\dot{m} = \rho * u * S \quad (3.30)$$

Les conditions statiques au niveau du col d'admission et du col d'échappement se calculent à partir des conditions amont et aval du col (ce sont les conditions génératrices ou conditions totales). Deux cas doivent être considérés : la tuyère est amorcée et le col est dit sonique, sinon le col est dit subsonique. La première étape consiste donc à déterminer la condition critique pour l'écoulement qui permet de distinguer les deux situations (sonique et subsonique).

3.7.1 Calcul de la condition critique

Le col des comes d'admission et d'échappement est modélisé comme représenté dans la Fig. 3.4. L'indice "0" correspond aux grandeurs totales (P_0 , T_0) et les grandeurs statiques de l'écoulement sont notées P et T . L'écoulement est supposé isentropique dans tout le domaine, et au repos au niveau des réservoirs amont (0) et aval (1).

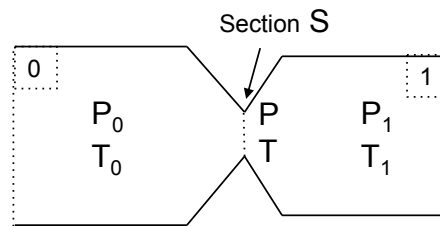


FIGURE 3.4 : Schéma du col d'une tuyère : l'indice "0" correspond aux conditions amont (P_0 et T_0) du col de section S , les conditions statiques au niveau du col sont notées P et T . L'indice "1" correspond aux conditions aval (P_1 et T_1) du col.

En l'absence de pertes de charge, la conservation de l'enthalpie totale donne :

$$h_0 = h + \frac{u^2}{2} = cte \quad (3.31)$$

En exprimant l'enthalpie $h = C_p T$ et le nombre de Mach $M = u/\sqrt{\gamma r T}$, le développement de

l'Eq. 3.31 permet d'obtenir le rapport de température et de pression en fonction du Mach local M dans chaque section de la conduite :

$$\frac{T_0}{T} = 1 + \frac{\gamma - 1}{2} * M^2 \quad (3.32)$$

$$\frac{P_0}{P} = \left(1 + \frac{\gamma - 1}{2} * M^2 \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (3.33)$$

L'Eq. 3.33 permet de calculer le rapport de pressions P_0/P à partir duquel la tuyère est amorcée (nombre de Mach noté M égal à 1). Ce rapport critique, C_{col} , permet de déterminer à tout instant du cycle thermodynamique le régime de l'écoulement :

$$C_{col} = \left(\frac{1 + \gamma}{2} \right)^{\frac{\gamma}{\gamma - 1}} \quad (3.34)$$

Pour $\gamma = 1.4$, $C_{col} = 1.89$ et pour $\gamma = 1.3$, $C_{col} = 1.83$. En conséquence, dans le cas du thermoréacteur, on s'attend à voir de nombreuses phases où les cols d'admission et d'échappement sont amorcés. En effet, dans le thermoréacteur, la pression d'admission est de 3 bars, menant donc à un amorçage possible du col à l'ouverture de la soupape d'admission quand la pression dans la chambre est de l'ordre de 1 bar. De même, au moment où les soupapes d'échappement s'ouvrent, la pression dans la chambre peut être de 15 à 20 bars, suggérant que le rideau d'échappement est amorcé pendant un temps assez long.

3.7.2 Expression du nombre de Mach en régime subsonique

Dans le cas où le col est amorcé, la condition $P_0/P \geq C_{col}$ est vérifiée et le nombre de Mach est égal à 1. Dans le cas contraire $P_0/P \leq C_{col}$, l'écoulement est subsonique, et le nombre de Mach se calcule à partir de :

$$M = \sqrt{\frac{2}{\gamma - 1} * \left(\left(\frac{P_0}{P} \right)^{\frac{(\gamma - 1)}{\gamma}} - 1 \right)} \quad (3.35)$$

3.7.3 Expressions du débit massique pour chaque régime de l'écoulement

Les expressions finales du débit massique calculé au col de section S (Fig. 3.4), pour les cas sonique et subsonique, sont données dans l'Eq. 3.36 et 3.37. Le débit massique au col s'exprime ainsi à partir des conditions thermodynamiques en amont (indice "0") et en aval (indice "1"), des conditions statiques au col et de la section de passage (S). Il dépend également de la composition de l'écoulement ($r = \frac{\mathcal{R}}{W}$, $\mathcal{R}$ étant la constante universelle des gaz parfaits et W la masse molaire du mélange).

$$\text{Col amorcé : } \dot{m} = C_d \frac{P_0 S \sqrt{\gamma}}{\sqrt{r T_0}} \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (3.36)$$

$$\text{Col subsonique : } \dot{m} = C_d \frac{P_0 S \sqrt{\gamma}}{\sqrt{r T_0}} \left(\frac{P_0}{P_1} \right)^{\frac{1}{\gamma_0}} \left[\frac{2}{\gamma - 1} \left(1 - \left(\frac{P_1}{P_0} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.37)$$

Le paramètre de décharge C_d est introduit pour tenir compte des pertes. Il vaut 1 pour une tuyère parfaite, et descend à 0.4 ou 0.5 pour des rideaux de soupape. Les coefficients de décharge de l'admission et de l'échappement sont inconnus. Pour les obtenir, nous utiliserons des calculs LES. Notons aussi que dans les Eq. 3.36 et 3.37, les surfaces de passage S varient avec le temps (Fig. 2.12). De même, il pourrait arriver que les C_d varient avec le temps mais nous nous contenterons d'une valeur moyenne obtenue pour la position de came la plus ouverte (Sec. 5.3.1).

En résumé, le débit massique au niveau d'une section S , qui correspond à une aire de passage minimale, s'exprime à partir des Eq. 3.36 et 3.37, où l'indice "0" correspond aux conditions en amont du col et l'indice "1" aux conditions en aval du col.

On admet que le col des soupapes d'admission et d'échappement est une aire de passage minimale où on peut ainsi exprimer les débits massiques entrant et sortant de la chambre. On donne dans la Tab. 3.1 la pression amont (P_0) et la pression aval (P_1) considérée pour chaque soupape d'admission et d'échappement.

TABLE 3.1 : Pressions employées pour le calcul des débits dans les Eqs 3.36 et 3.37.

	P_0	P_1
Soupape admission	P_{adm}	P_{cc}
$\dot{m}_{in}$		
Soupape échappement	P_{cc}	P_{echap}
$\dot{m}_{out}$		

Dans la section suivante, nous allons ainsi exprimer les débits massiques d'admission et d'échappement à partir des conditions amont et aval de chaque soupape.

3.7.4 Expression des débits massiques au niveau des systèmes d'admission $\dot{m}_{in}$ et d'échappement $\dot{m}_{out}$ du système étudié

La Fig. 3.5 reprend l'organisation du modèle 0D proposée dans la Fig. 3.1, et fait apparaître les grandeurs thermodynamiques associées à chaque sous-système. Les débits massiques entrant ($\dot{m}_{in}$) et sortant ($\dot{m}_{out}$) du volume de contrôle V_{cc} se calculent au niveau du col des cames (section de passage notée S_{in} pour les cames d'admission et S_{out} pour les cames d'échappement) à partir des Eq. 3.36 et 3.37 et de la Tab. 3.1.

Pour chaque cas (admission et échappement), il est nécessaire de prendre en compte les conditions amont (indice "0") et aval (indice "1") du col considéré, qui sont différentes si on se place au niveau du col d'admission ou au niveau du col d'échappement (Tab. 3.1).

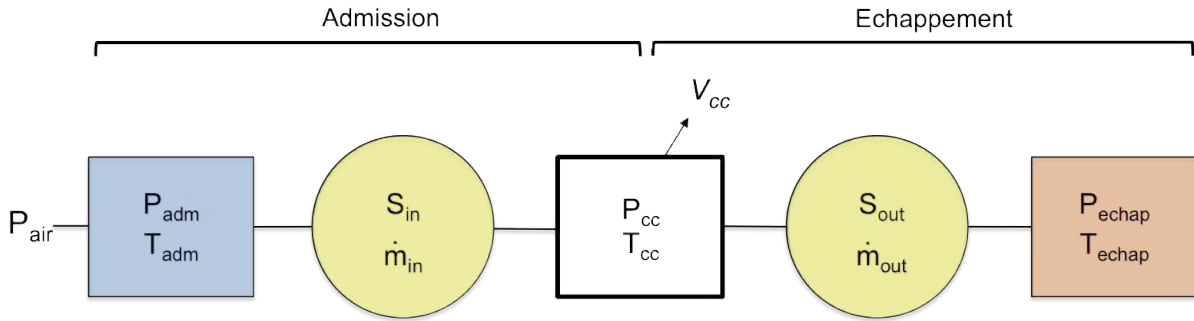


FIGURE 3.5 : Schéma : organisation modèle 0D

- Débit massique à l'admission $\dot{m}_{in}$:

Au niveau du col d'admission, les conditions amont correspondent aux conditions thermodynamiques dans le réservoir d'admission (indice "adm"), et les conditions aval sont celles de la chambre de combustion (indice "cc"). Le rapport des capacités calorifiques γ utilisé est celui des gaz frais γ_{GF} (seuls des gaz frais entrent dans la chambre). Le nombre de Mach au col d'admission est noté M_{in} . Le jeu d'équations utilisé pour le calcul du débit massique entrant $\dot{m}_{in}$ est :

$$M_{in} = 1 : \quad \dot{m}_{in} = C_d \frac{P_{adm} * S_{in} * \sqrt{\gamma_{GF}}}{\sqrt{r * T_{adm}}} * \left(\frac{2}{\gamma_{GF} + 1} \right)^{\frac{\gamma_{GF} + 1}{2(\gamma_{GF} - 1)}} \quad (3.38)$$

$$M_{in} < 1 : \quad \dot{m}_{in} = C_d \frac{P_{adm} * S_{in} * \sqrt{\gamma_{GF}}}{\sqrt{r * T_{adm}}} * \left(\frac{P_{adm}}{P_{cc}} \right)^{\frac{1}{\gamma_{GF}}} \left[\frac{2}{\gamma_{GF} - 1} \left(1 - \left(\frac{P_{cc}}{P_{adm}} \right)^{\frac{\gamma_{GF} - 1}{\gamma_{GF}}} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.39)$$

- **Débit massique à l'échappement** $\dot{m}_{out}$:

Pour la partie échappement, les conditions amont correspondent aux conditions dans la chambre de combustion (indice cc) tandis que les conditions aval sont celles du réservoir aval (indice $echap$). Le rapport des capacités calorifiques γ est supposé égal au rapport des capacités calorifiques moyen dans la chambre, γ_{cc} . Le débit massique sortant de la chambre de combustion $\dot{m}_{out}$ se calcule à partir des équations suivantes :

$$M_{out} = 1 : \quad \dot{m}_{out} = C_d \frac{P_{cc} * S_{out} * \sqrt{\gamma_{cc}}}{\sqrt{r * T_{cc}}} * \left(\frac{2}{\gamma_{cc} + 1} \right)^{\frac{\gamma_{cc} + 1}{2(\gamma_{cc} - 1)}} \quad (3.40)$$

$$M_{out} < 1 : \quad \dot{m}_{out} = C_d \frac{P_{cc} * S_{out} * \sqrt{\gamma_{cc}}}{\sqrt{r * T_{cc}}} * \left(\frac{P_{cc}}{P_{echap}} \right)^{\frac{1}{\gamma_{cc}}} \left[\frac{2}{\gamma_{cc} - 1} \left(1 - \left(\frac{P_{echap}}{P_{cc}} \right)^{\left(\frac{\gamma_{cc} - 1}{\gamma_{cc}} \right)} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (3.41)$$

3.8 Pertes thermiques

Les transferts thermiques entre les parois de la chambre de combustion et le fluide correspondent principalement à de la convection. Le flux de chaleur échangé noté q_{wall} est proportionnel à la surface d'échange S et à la différence de température entre la surface T_{wall} et le fluide T_{flow} :

$$q_{wall} = h S (T_{wall} - T_{flow}) \quad (3.42)$$

La constante de proportionnalité h est appelée coefficient de transfert thermique et doit être obtenue par des corrélations. Dans le cas des moteurs à piston, ce problème est bien connu et la corrélation de Woschni [55] est un exemple classique de corrélation fittée pour les moteurs à piston. Dans le cadre de cette thèse on a préféré se baser sur des corrélations plus classiques basées sur le flux thermique aux parois d'un tube en écoulement turbulent.

3.8.1 Détermination du coefficient de transfert thermique h ($W/m^2/K$)

Le coefficient de transfert thermique h dépend des propriétés de la couche limite, c'est à dire de la géométrie de la surface d'échange S , de la vitesse et de la nature du mouvement du fluide, ainsi que des propriétés thermiques du fluide. Ainsi, il peut être calculé à partir du nombre de Nusselt :

$$h = \frac{\lambda Nu}{D} \quad (3.43)$$

Pour le volume de contrôle V_{cc} correspondant à la chambre de combustion, D est choisi

comme étant le diamètre intérieur de la chambre de combustion. λ correspond à la conductivité thermique du fluide ($W/m/K$). Le nombre de Nusselt Nu caractérise l'échange thermique entre le fluide et la paroi. Il peut s'interpréter comme le rapport entre le flux thermique par convection et le flux thermique de conduction dans le fluide.

3.8.2 Détermination du nombre de Nusselt Nu par corrélation dans un écoulement turbulent

Dans le cas d'un écoulement turbulent établi dans un tube lisse (c'est à dire pour des nombres de Reynolds supérieurs à 4000), la formule de Colburn permet de calculer le nombre de Nusselt à partir du nombre de Reynolds et du nombre de Prandtl [56] :

$$Nu = 0.023 Re^{0.8} Pr^{0.33} \quad (3.44)$$

Le nombre de Prandtl Pr caractérise les propriétés thermiques du fluide. Il correspond au rapport entre les diffusivités de quantité de mouvement et de chaleur : $Pr = \frac{\mu C_p}{\lambda}$. Dans les conditions normales de température et pression, le nombre de Prandtl Pr a une valeur de 0.7 pour l'air et il varie peu quand la pression et la température montent.

Le nombre de Reynolds Re caractérise le régime d'écoulement et est donné par : $Re = \frac{\rho U D}{\mu}$, où ρ est la masse volumique du fluide en kg/m^3 . Il mesure le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses.

L'inconnue dans l'expression du nombre de Reynolds est la vitesse du fluide, notée U . U est la vitesse moyenne du fluide, et dans un CVC son expression dépend de la phase du cycle (Fig. 3.6) :

- quand les cames sont ouvertes, la vitesse considérée dans l'expression du nombre de Reynolds est la vitesse au col des cames d'admission ($U = U_{in}$). Cette vitesse est calculée à partir du nombre de Mach (Eq. 3.35) et des conditions statiques de l'écoulement au niveau du col des cames :

$$U = U_{in} = \frac{\dot{m}_{in}}{\rho S} \quad (3.45)$$

où $\dot{m}_{in}$ est donné par les Eq. 3.38 et 3.39. S est la section de passage minimale au col des cames d'admission et ρ correspond aux conditions statiques au col des cames.

- lorsque les cames d'admission et d'échappement sont fermées, la vitesse moyenne devient nulle ($U_{in} = 0$), et la vitesse alors considérée dans le calcul du nombre de Reynolds correspond à la vitesse de rotation dans la chambre. Cette vitesse décroît au cours du temps et nous l'estimerons comme si c'était la vitesse RMS d'une turbulence homogène décroissante. On utilise là aussi la LES pour caler le modèle de décroissance de U (Sec. 5.3.2). L'expression de U est :

$$U = U_0 \left[1 + (C_{\varepsilon 2} - 1) \frac{t - t_0}{\tau_{0,EBU}} \right]^{\frac{-1}{2(C_{\varepsilon 2} - 1)}} \quad (3.46)$$

$$\text{avec} \quad U_0 = a U_{in}^{max} \quad (3.47)$$

$$\text{et} \quad \tau_{0,EBU} = \frac{L_c}{U_0} \quad (3.48)$$

Le temps t_0 correspond à l'instant où les cames sont toutes fermées. $\tau_{0,EBU}$ est le temps turbulent à t_0 , la modélisation de ce temps turbulent est détaillée dans la Sec. 3.9.3.

La vitesse U_0 , est la valeur initiale de U à t_0 , et est fonction de la vitesse maximale U_{in}^{max} "enregistrée" au cours de l'admission au col des cames. La constante de proportionnalité a qui lie U_0 à U_{in}^{max} (Eq. 3.48) est déterminée à partir de LES non réactives du thermoréacteur, tout comme la constante $C_{\varepsilon 2}$. Il est clair qu'il s'agit d'une modélisation approximative qui suppose que la vitesse de rotation dans la chambre quand les soupapes se ferment est proportionnelle au maximum de la vitesse d'injection pendant l'admission. Même si cette hypothèse est approximative, elle reste assez physique et employer la LES pour trouver la constante a permet de caler le modèle de façon précise. La méthodologie est détaillée dans la Sec. 5.3.2.

La Fig. 3.6 résume les deux expressions de U intervenant dans le calcul des flux thermiques : l'Eq. 3.45 est utilisée lors de la phase d'admission et l'Eq. 3.46 lors de la phase de combustion.

A ce stade, il faut noter que modéliser le transfert thermique aux parois d'une chambre CVC par une corrélation issue de flux dans un tube turbulent établi, est à l'évidence très approximatif. Dans une chambre CVC, les couches limites sont nettoyées et recrées à chaque cycle à cause de la pulsation de vitesse. Ceci a pour effet d'augmenter considérablement les transferts thermiques. Il faut donc s'attendre à ce que les valeurs de h et Nu prédites par les Eq. 3.43 et 3.44 sous estiment le flux réel.

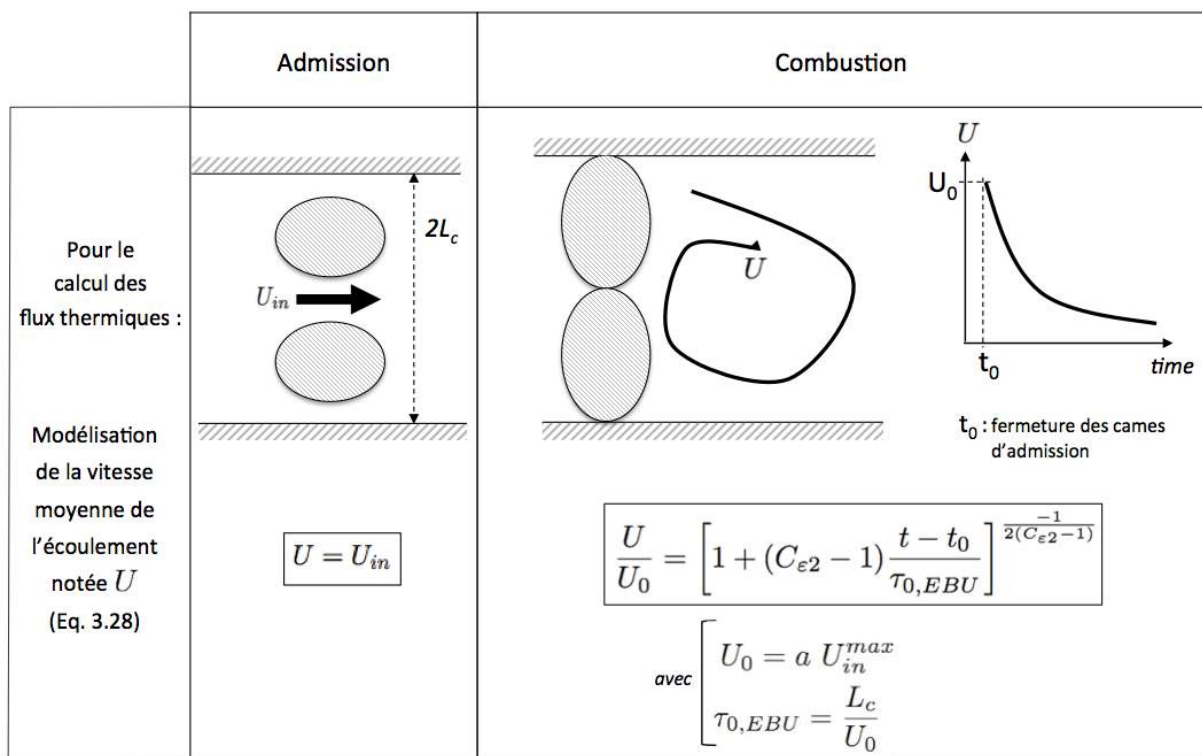


FIGURE 3.6 : Modélisation de la vitesse en fonction de la phase du cycle

3.9 Modélisation de la combustion

Le dernier terme manquant dans l'Eq. 3.29 est le taux de dégagement de chaleur intégré dans toute la chambre $\dot{\Omega}_T$. Dans un modèle 0D, ce terme doit être approximé par des modèles simplistes utilisant ce que l'on sait de la physique de ces flammes.

Durant les premiers instants où le mélange carburé s'enflamme, le régime de combustion des gaz est généralement laminaire, le taux de réaction correspondant à ce régime laminaire est noté $\dot{\Omega}_{F,lam}$. Le front de flamme se développe de façon sphérique autour du point d'allumage. Ce front de flamme est lisse et caractérisé par une faible épaisseur (quelques dixièmes de millimètres). L'interface réactive transformant les gaz frais en gaz brûlés est ensuite perturbée par les structures turbulentes de l'écoulement, qui vont plisser la flamme et accélérer la vitesse de consommation des gaz réactifs. Le régime de propagation de la flamme est dit turbulent, le taux de réaction turbulent est noté $\dot{\Omega}_{F,turb}$. Nous allons proposer des modèles pour ces deux termes et voir comment les coupler.

3.9.1 Expression du taux de réaction laminaire $\dot{\Omega}_{F,lam}$

Pendant la propagation sphérique de la flamme de rayon r_{lam} et de vitesse laminaire S_L , le taux de réaction est :

$$\dot{\Omega}_{F,lam} = \frac{\rho_0}{V_{cc}} Y_F^0 4\pi r_{lam}^2 S_L \quad (3.49)$$

où ρ_0 et Y_F^0 sont respectivement la masse volumique du mélange au moment de l'allumage et la fraction massique initiale de carburant dans les gaz frais, que l'on suppose constante au cours de la combustion. Il est clair que ce modèle néglige toute stratification du mélange qui est supposé parfait au moment de l'allumage.

- Détermination de la vitesse de flamme laminaire

La vitesse laminaire de flamme S_L est fortement dépendante de la pression et de la température du mélange [28] et peut s'exprimer à partir de conditions thermodynamiques de référence $T_0 = 300$ K et $P_0 = 1$ bar :

$$S_L(P, T, \phi) = S_{L,0}(\phi) \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\alpha_P} \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\alpha_T} \quad (3.50)$$

où $S_{L,0}$ correspond à la vitesse de flamme laminaire dans les conditions de référence T_0 et P_0 . Des mesures expérimentales sur des flammes propane/air et méthane/air, à différentes richesses, ont permis de dresser un tableau de valeurs pour les exposants relatifs à la température α_T et à la pression α_P [28].

On utilise ici $\alpha_P = -0.366$ et $\alpha_T = 2.128$. $S_{L,0}(\phi)$ dépend de la richesse du mélange et est donnée par la Fig. 3.7 pour un mélange isooctane-air. Les résultats ont été obtenus avec le mécanisme détaillé proposé par Jerzembeck [57] à partir du code Cantera [58].

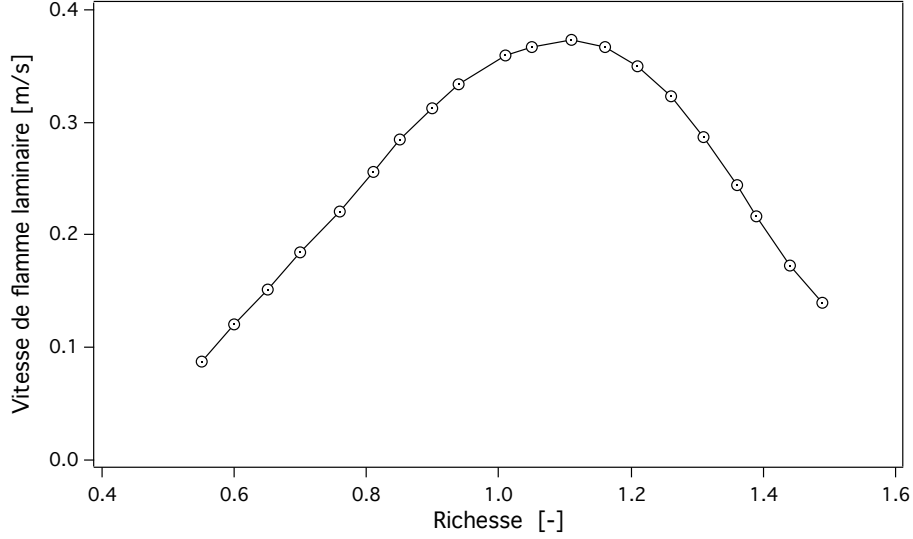


FIGURE 3.7 : Evolution de la vitesse de flamme laminaire $S_{L,0}(\phi)$ en fonction de la richesse ϕ du mélange isooctane-air à : $P_0 = 1$ bar et $T_0 = 300$ K.

- Détermination du rayon de flamme laminaire

Dans l'expression 3.49, r_{lam} est le rayon de la flamme laminaire supposée sphérique. Il est donné par l'expression classique :

$$\frac{dr_{lam}}{dt} = \frac{\rho_{GF}}{\rho_{GB}} S_L \quad (3.51)$$

La masse molaire des gaz dans la chambre de combustion varie peu, la constante spécifique des gaz frais, r_{GF} , et celle des gaz brûlés, r_{GB} , sont supposées égales ($r_{GF} = r_{GB} = r$). L'augmentation du rayon de la flamme ne dépend alors que de la vitesse laminaire de la flamme S_L et du rapport de température des gaz brûlés T_{GB} et des gaz frais T_{GF} :

$$\frac{dr_{lam}}{dt} = \frac{T_{GB}}{T_{GF}} S_L \quad (3.52)$$

Durant la phase de combustion, le noyau de flamme grossit dans la chambre de combustion, comprimant les gaz frais contre les parois. Ils subissent une compression isentropique et leur température T_{GF} varie suivant :

$$T_{GF} = T_{GF}^0 \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\frac{\gamma_{GF}-1}{\gamma_{GF}}} \quad (3.53)$$

où T_{GF}^0 et P_0 sont respectivement la température et la pression des gaz frais à l'instant de l'allumage, γ_{GF} est le rapport des capacités calorifiques des gaz frais à la température T_{GF} .

La combustion se déroulant à volume constant, l'augmentation de température est déterminée à partir de la capacité calorifique du gaz à volume constant ($C_v = \frac{r}{\gamma-1}$). La température maximale atteinte en fin de combustion est :

$$T_{GB} = T_{GF} + \frac{Q}{C_v} \quad (3.54)$$

Le rapport des capacités calorifiques γ est fonction de la température et de la richesse du mélange, ainsi que du carburant utilisé. Q est l'apport calorifique du carburant calculé à partir du pouvoir calorifique et de la fraction massique du carburant $Q = PCI * Y_F$.

L'équation finale traduisant l'augmentation du rayon de la flamme en régime laminaire est :

$$\frac{dr_{lam}}{dt} = \left(1 + \frac{Q}{C_v T_{GF}} \right) S_L \quad (3.55)$$

3.9.2 Modélisation du taux de réaction turbulent $\dot{\Omega}_{F,turb}$ par un modèle de type EBU

Quand la flamme est suffisamment grosse, elle perd sa structure laminaire et devient turbulente. La flamme est alors plissée par les structures turbulentes de l'écoulement, elle accélère et ne se propage plus de manière laminaire mais turbulente.

Prendre en compte la combustion turbulente dans un modèle 0D n'est pas facile. Ici, on a un modèle de type Eddy BreakUp (EBU) qui peut être formulé dans une approche zéro-dimensionnelle. Très utilisé dans les moteurs à combustion interne, le modèle EBU a été initialement proposé par Spalding [59, 60]. Il fut ensuite modifié par Magnussen and Hiertager (1977). Ce modèle est aujourd'hui encore très utilisé parmi tous les modèles de combustion présents dans la littérature et repose sur l'hypothèse que le taux de réaction est principalement contrôlé par le mélange turbulent. L'écoulement turbulent augmente le mélange et la diffusion des espèces, ce qui crée des modifications de température et de concentration, et influence ainsi le taux de réaction. A partir de cette forte interaction entre la combustion et turbulence, Spalding modélise le taux de réaction moyen $\bar{\omega}_\Theta$ (Eq. 3.56) à partir d'un temps caractéristique du mélange turbulent τ_{EBU} et des fluctuations de température $\overline{\Theta'^2}$.

$$\bar{\omega}_\Theta = C_{EBU} \bar{\rho} \frac{\sqrt{\overline{\Theta'^2}}}{\tau_{EBU}} \quad (3.56)$$

La modélisation du temps turbulent τ_{EBU} est détaillée dans la Sec. 3.9.3. La constante du modèle EBU notée C_{EBU} est déterminée à partir de simulations LES, comme expliqué dans la Sec. 5.3.2. Pour estimer les fluctuations de température $\widetilde{\Theta''^2}$, le modèle est basé sur l'hypothèse que la flamme est infiniment fine, la température varie donc instantanément de $\Theta = 0$ dans les gaz frais à $\Theta = 1$ dans les gaz brûlés et la pdf de Θ correspond donc à un signal télégraphique avec deux pics à $\theta = 0$ et $\theta = 1$. Ainsi le terme $\rho \widetilde{\Theta''^2}$ se simplifie [28] :

$$\overline{\rho \widetilde{\Theta''^2}} = \overline{\rho (\Theta - \widetilde{\Theta})^2} = \overline{\rho (\Theta^2 - 2\Theta\widetilde{\Theta} + \widetilde{\Theta}^2)} = \overline{\rho \Theta^2} - 2\overline{\rho \Theta} \widetilde{\Theta} + \overline{\rho \widetilde{\Theta}^2} = \overline{\rho \Theta^2} - \overline{\rho \Theta}^2 = \overline{\rho} (\widetilde{\Theta}^2 - \widetilde{\Theta}^2) = \overline{\rho} \widetilde{\Theta} (1 - \widetilde{\Theta}) \quad (3.57)$$

L'expression du taux de réaction moyen dans le modèle EBU est ici donné par :

$$\overline{\omega}_{\Theta} = C_{EBU} \frac{\overline{\rho}}{\tau_{EBU}} \widetilde{\Theta} (1 - \widetilde{\Theta}) \quad (3.58)$$

Dans l'outil CVC0D proposé dans cette thèse, la modélisation du taux de réaction turbulent est basée sur l'évolution de la fraction massique moyenne de carburant Y_F dans la chambre au cours de la réaction :

$$\dot{\Omega}_{F,turb} = C_{EBU} \frac{\rho_{GF} \frac{Y_F}{Y_{F0}} \left(1 - \frac{Y_F}{Y_{F0}}\right)}{\tau_{EBU}} V_{cc} \quad (3.59)$$

où ρ_{GF} est la masse volumique des gaz frais au cours de la réaction chimique. Y_{F0} est la fraction massique de carburant au moment de l'allumage (supposée homogène). La Sec. 3.5 détaille le calcul de la fraction massique de carburant Y_F à chaque instant du cycle.

3.9.3 Modélisation du temps turbulent

Dans la modélisation EBU, le temps caractéristique de la combustion est supposé inférieur au temps caractéristique de mélange piloté par la turbulence. Ainsi, le temps turbulent τ_{EBU} considéré dans l'Eq. 3.59 correspond au temps que met une structure de l'écoulement à se dissiper.

Le temps turbulent τ_{EBU} est estimé à partir du modèle de turbulence k - ε , k étant l'énergie cinétique turbulente et ε le taux de dissipation :

$$\tau_{EBU} = \frac{k}{\varepsilon} \quad (3.60)$$

Le modèle k - ε est un modèle du 1er ordre à deux équations, initialement proposé par Jones et Launder en 1972 [61]. k l'énergie cinétique turbulente et ε le taux de dissipation sont décrits par les deux équations d'équilibre 3.61 et 3.62.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + P_k - \bar{\rho}\varepsilon \quad (3.61)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\bar{\rho}\tilde{u}_i \varepsilon) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.62)$$

Le modèle k - ε est un modèle 3D nécessitant une résolution locale incompatible avec CVC0D. Comme EBU, il peut être simplifié pour être adapté à une formulation 0D. En effet, dans un domaine fermé où on néglige les gradients spatiaux, k et ε , qui représentent respectivement l'énergie cinétique turbulente moyennée dans la chambre et sa dissipation, décroissent comme dans une turbulence homogène isotrope. Le modèle k - ε s'exprime alors à partir des équations suivantes :

$$\frac{dk}{dt} = -\varepsilon \quad (3.63)$$

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = -C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (3.64)$$

où $C_{\varepsilon 2}$ est une constante du modèle habituellement fixée à 1.92. A partir des Eq. 3.63 et 3.64, le temps turbulent se détermine à partir de :

$$\tau_{EBU} = (C_{\varepsilon 2} - 1) t + \tau_{0,EBU} \quad (3.65)$$

où $\tau_{0,EBU}$ correspond au temps caractéristique initial au moment où les cames se ferment simultanément. Il peut s'exprimer comme :

$$\tau_{0,EBU} = \frac{L_c}{U_0} \quad (3.66)$$

La longueur caractéristique L_c est choisie comme étant égale à la demi hauteur de la chambre de combustion. U_0 est définie par l'Eq. 3.47.

3.9.4 Transition entre les phases laminaire et turbulente

L'expression laminaire du taux de réaction $\dot{\Omega}_F$ (Eq. 3.49) est utilisée au début de chaque cycle de combustion. Elle est ensuite remplacée par l'expression turbulente du taux de réaction (Eq. 3.56). Cette transition est faite quand le taux de réaction turbulent est supérieur au taux de réaction laminaire. On arrête alors d'utiliser l'expression laminaire pour passer à la formulation EBU.

Chapitre 4

Simulation aux grandes échelles en maillage mobile : comparaison des méthodes des frontières immergées (IBC) et de grilles superposées (MISCOG).

Sommaire

4.1	Différentes approches numériques : DNS/LES/RANS	55
4.2	La simulation aux grandes échelles (LES) pour les écoulements réactifs turbulents dans AVBP	57
4.2.1	Filtrage LES des équations de Navier-Stokes	57
4.2.2	Expression des flux laminares	58
4.2.3	Modélisation des termes de sous maille	58
4.2.4	Modèle de viscosité turbulente : modèle de WALE	60
4.3	Gestion des parties mobiles en rotation	60
4.3.1	La méthode des frontières immergées : IBC (Immersed Boundary Conditions)	60
4.3.2	L'approche MISCOG (Multi Instances Solver Coupled on Overlapping Grids)	62
4.3.3	Comparaison des approches IBC et MISCOG	64

Afin d'effectuer des calculs de la chambre CVC, deux choix de modèles et de méthodes numériques doivent être faits :

- le modèle de turbulence : on a décidé d'utiliser la LES qui est la méthode la mieux adaptée à la combustion instationnaire dans une chambre CVC. Les principes du filtrage LES en combustion sont rappelés en Sec. 4.1 et 4.2.

- la méthode numérique pour gérer des parties tournantes dans une approche LES : la Sec. 4.3 présente les tests effectués pour identifier la méthode permettant de gérer la rotation des valves de la chambre CVC dans le code LES employé ici. On teste la méthode des frontières immergées (IBC pour *Immersed Boundary Conditions*) [62, 63] et une méthode de maillages mobiles appelée MISCOG (*Multi Instances Solver Coupled on Overlapping Grids*) [64, 65].

4.1 Différentes approches numériques : DNS/LES/RANS

Il existe trois principales approches numériques en mécanique des fluides pour simuler des écoulements turbulents réactifs. Elles diffèrent par le rapport entre les échelles turbulentes résolues et celles modélisées, comme représenté dans les Figs. 4.1 et 4.2.

- Tout d'abord la simulation numérique directe (DNS pour *Direct Numerical Simulation*) consiste à résoudre l'ensemble du spectre turbulent (Fig. 4.1). Toutes les échelles de la turbulence doivent être captées et calculées, ce qui nécessite des maillages extrêmement raffinés. L'utilisation de cette approche sur des applications industrielles (telles que le thermoréacteur) est, encore aujourd'hui, très coûteuse malgré l'amélioration des supercalculateurs. La DNS se trouve donc limitée à l'étude de domaines de calcul n'excédant pas quelques centimètres.
- A l'inverse de la DNS, les simulations des équations de Navier-Stokes moyennées au sens de Reynolds (RANS pour *Reynolds Average Navier Stokes Simulation*) permettent d'obtenir le champ moyen de chaque variable (Fig. 4.2). Aucune échelle de la turbulence n'est résolue, des modèles de turbulence sont donc nécessaires pour prendre en compte l'influence des échelles de la turbulence sur les grandeurs thermodynamiques calculées. Ce type d'approche est difficilement applicable dans le contexte de la combustion à volume constant car elle met en jeu de nombreux effets transitoires et instationnaires qui ne sont pas modélisés dans une approche RANS.
- La simulation aux grandes échelles (LES pour *Large Eddy Simulation*) constitue un intermédiaire entre les méthodes RANS et l'approche DNS. En effet, elle s'intéresse à résoudre les grandes structures énergétiques de l'écoulement et modélise ce qui se passe au niveau des plus petites échelles. Basée sur la description de la turbulence proposée par Kolmogorov [66], la LES part du principe que les grandes échelles contribuent fortement à la dissipation turbulente de la quantité de mouvement, de la chaleur et des espèces ; l'énergie des petites structures turbulentes peut ainsi être déduite de l'énergie des plus grandes.

Le code AVBP co-développé par le CERFACS et l'IFP-EN utilise l'approche LES. La Sec. 4.2 présente brièvement la méthode pour des écoulements réactifs turbulents.

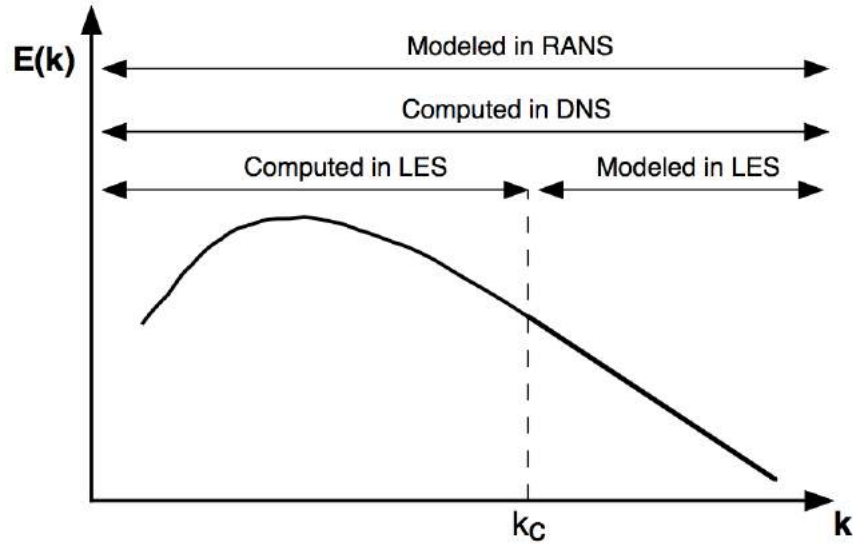


FIGURE 4.1 : Schéma de principe des trois approches (DNS, LES et RANS) dans l'espace spectral. Image extraite de [28].

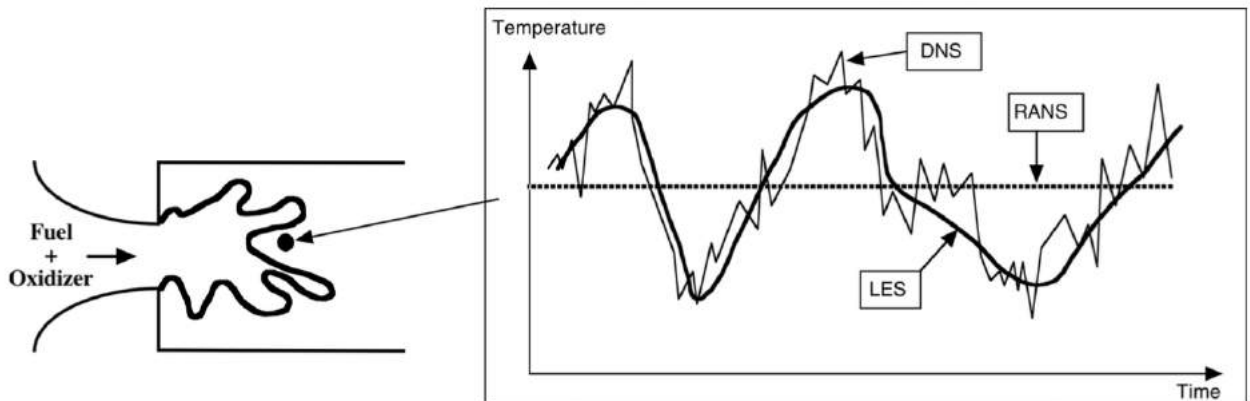


FIGURE 4.2 : Schéma illustrant l'évolution locale de température dans une flamme turbulente calculée avec les trois approches (DNS, LES et RANS). Image extraite de [28]

4.2 La simulation aux grandes échelles (LES) pour les écoulements réactifs turbulents dans AVBP

4.2.1 Filtrage LES des équations de Navier-Stokes

Les équations de transport d'une simulation aux grandes échelles (LES) décrivent l'évolution des grandeurs filtrées de l'écoulement et modélisent l'influence de la partie de sous-maille qui n'est pas résolue. La séparation entre les échelles calculées et modélisées se fait par une opération de filtrage des équations de Navier-Stokes, qui consiste à définir la quantité filtrée $\bar{f}$ comme le produit de convolution de la quantité non filtrée f avec un filtre spatial G_Δ de taille caractéristique Δ :

$$\bar{f}(x) = \int f(x') G_\Delta(x' - x) dx' \quad (4.1)$$

Le filtre G_Δ est généralement de type boîte ou gaussien [67]. La quantité filtrée $\bar{f}$ est calculée en résolvant numériquement son équation de transport. La quantité de sous-maille non résolue est $f' = f - \bar{f}$. Pour les écoulements à densité variable, le filtrage défini par l'Eq. 4.1 appliqué à l'équation de conservation de la masse (Eq. 3.10) introduit le terme $\overline{\rho' u'_i}$ dans l'équation de conservation de la densité filtrée. Pour éviter de modéliser explicitement ce terme, il est pratique d'utiliser le filtrage de Favre (filtrage pondéré par la masse volumique) dans le cas d'écoulement compressible :

$$\tilde{f} = \frac{\bar{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (4.2)$$

Ainsi, on obtient les équations de conservation de type LES en filtrant les équations de Navier-Stokes instantanées (Eq. 3.10, 3.11, 3.12 et 3.13) :

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial x_j} = 0 \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{u}_i}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\tau}_{ij} - \bar{\tau}_{ij}^t \right) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \bar{F}_i \quad \text{avec :} \quad i = 1, 2, 3 \quad (4.4)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k}{\partial x_j} = - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{J}_{s,k}^t \right) + \frac{\partial \bar{V}_{k,i} Y_k}{\partial x_i} + \bar{\omega}_k \quad \text{avec :} \quad k = 1, N \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E}) = \bar{\omega}_T + \bar{Q}_\Delta - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{q}_j + \bar{q}_j^t) - \frac{\partial}{\partial x_j} (\overline{u_i (p \delta_{ij} - \tau_{ij})}) \quad (4.6)$$

4.2.2 Expression des flux laminaires

Les termes de flux laminaires d'espèces et d'enthalpie sont généralement faibles devant les flux turbulents et peuvent soit être négligés soit être exprimés de façon simple à partir des gradients résolus.

- Flux laminaire d'espèce $\overline{J_{i,k}}$:

$$\overline{J_{i,k}} = -\rho \overline{\left(D_k \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right)} \quad (4.7)$$

$$\overline{J_{i,k}} \approx -\bar{\rho} \left(\overline{D_k} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \quad (4.8)$$

$$\text{avec : } \tilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^N \overline{D_k} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (4.9)$$

$$\overline{D_k} \approx \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} Sc_k} \quad (4.10)$$

- Flux laminaire d'énergie $\overline{q_i}$:

$$\overline{q_i} = -\lambda \frac{\partial \overline{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \quad (4.11)$$

$$\overline{q_i} \approx -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} \tilde{h}_{s,k}} \quad (4.12)$$

$$\text{avec : } \bar{\lambda} = \frac{\bar{\mu} \overline{C_p}(\tilde{T})}{Pr} \quad (4.13)$$

- Tenseur des contraintes laminaires $\overline{\tau_{ij}}$:

$$\overline{\tau_{ij}} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right) \approx 2\bar{\mu} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll} \right) \quad (4.14)$$

$$\text{avec : } \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad \text{et : } \bar{\mu} \approx \mu(\tilde{T}) \quad (4.15)$$

4.2.3 Modélisation des termes de sous maille

• Tenseur de Reynolds $(\tilde{u}_i \tilde{u}_j)$: il nécessite un modèle de turbulence de sous maille afin de reproduire les flux d'énergie entre les échelles de la turbulence résolues et modélisées. A

partir de l'hypothèse de viscosité turbulente de Boussinesq [68], le tenseur de Reynolds peut s'exprimer à partir du tenseur des contraintes visqueuses :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho}(\widetilde{u_i u_j}) = 2\overline{\mu_t} \left(\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \widetilde{S_{ll}} \right) \quad (4.16)$$

La viscosité turbulente ν_t est calculée par le modèle de sous-maille de Wale détaillé dans la Sec. 4.2.4.

- Les flux turbulents d'espèces $(\widetilde{u_i \widetilde{Y_k}} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k})$ sont modélisés de la même manière que le tenseur de Reynolds selon :

$$\overline{J_{i,k}} = \bar{\rho}(\widetilde{u_i \widetilde{Y_k}} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k}) = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} \widetilde{V_i^{c,t}} \right) \quad (4.17)$$

$$\text{avec : } \quad \widetilde{V_i^{c,t}} \approx \sum_{k=1}^n \overline{D_k^t} \frac{W_k}{\overline{W}} \frac{\partial \widetilde{X_k}}{\partial x_i} \quad (4.18)$$

Le coefficient de diffusion massique turbulent de l'espèce k est exprimé à partir du nombre de Schmidt Sc_k^t (fixé à 1 pour toutes les espèces de manière usuelle) et de la viscosité turbulente $\nu_t = \frac{\mu_t}{\rho}$.

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \quad (4.19)$$

- Le flux turbulent de chaleur $\overline{q_i}^t$ est modélisé par :

$$\overline{q_i}^t = \bar{\rho}(\widetilde{u_i \widetilde{E}} - \widetilde{u_i} \widetilde{E}) = -\overline{\lambda_t} \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h_{s,k}} \quad (4.20)$$

$$\text{avec : } \quad \lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr_t} \quad (4.21)$$

Dans les simulations présentées ici, le nombre de Prandtl turbulent a été fixé à $Pr_t = 0.69$.

- Le terme source chimique de l'espèce $\overline{\dot{\omega}_k}$ correspond à un point clef dans la simulation de combustion turbulente. Le modèle de fermeture de ce terme est détaillé dans la Sec. 6.1.2.

4.2.4 Modèle de viscosité turbulente : modèle de WALE

Dans tous les calculs LES présentés dans cette thèse, le modèle de viscosité turbulente utilisé est le modèle de Wale [69]. Il a été notamment développé afin d'obtenir un comportement réaliste de la viscosité turbulente en proche paroi, par rapport au modèle de Smagorinsky [70]. La viscosité turbulente cinématique du modèle de WALE est définie par :

$$\nu_t = (C_w \Delta)^2 \frac{(s_{ij}^d s_{ij}^d)^{3/2}}{(\tilde{S}_{ij} \tilde{S}_{ij})^{5/2} + (s_{ij}^d s_{ij}^d)^{5/4}} \quad (4.22)$$

$$\text{avec : } s_{ij}^d = \frac{1}{2}(\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2) - \frac{1}{3}\tilde{g}_{kk}^2 \delta_{ij} \quad (4.23)$$

La constante C_w a été évaluée lors de tests à priori sur une turbulence homogène isotrope, elle est fixée à $C_w = 0.4929$. $\tilde{g}_{ij}$ correspond au gradient de vitesses résolues : $\tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i}$

4.3 Gestion des parties mobiles en rotation

La difficulté dans la mise en place de simulations numériques du thermoréacteur réside dans la gestion des parties mobiles du système étudié dans un formalisme LES. Des méthodes existantes type ALE (*Arbitrary Lagrangian Eulerian*) permettent déjà de gérer des translations de maillage [71, 72, 73] mais ne sont pas applicables dans le cas de rotation de maillage car la déformation des mailles induite est trop élevée, tout comme la fréquence des phases d'interpolation [22]. Deux méthodologies ont été envisagées au cours de cette thèse dans le cadre de le LES réactive : la méthode IBC et la méthode MISCOG.

4.3.1 La méthode des frontières immergées : IBC (*Immersed Boundary Conditions*)

Les méthodes des frontières immergées (IBC pour *Immersed Boundary Conditions*) [62, 63] sont très intéressantes car elles permettent de traiter des corps immergés en mouvement ou contraints à des déformations, ce pour des géométries complexes. Contrairement aux méthodes type ALE qui nécessitent plusieurs maillages, les méthodes IBC ne nécessitent qu'un seul maillage pour modéliser l'obstacle immergé et utilisent un terme de forçage qui agit sur l'écoulement à la place de la frontière. Ce terme de forçage permet d'éviter la création d'un maillage «Body conformal» (Fig. 4.3) car le corps n'est plus explicitement discrétisé (Fig. 4.4). C'est pourquoi l'implémentation d'une méthode IBC dans le code d'AVBP semble très intéressante pour calculer un écoulement créé par des obstacles en rotation.

Peskin a été le premier à utiliser cette méthode en 1972 [74] pour simuler l'écoulement à l'intérieur d'un coeur humain. La méthode a ensuite été appliquée dans de nombreux domaines : écoulements compressibles [75, 76], flux de particules [77], écoulements à micro-échelle [78],

interaction entre des corps solides [79], transferts thermiques conjugués [80], flux environnementaux [81], fluides bio [82].

Pour des raisons purement numériques, l'implémentation de la méthode IBC dans le code AVBP est basée sur le module Lagrangien développé par Marta Garcia [83], pour le traitement d'écoulements diphasiques. La Fig. 4.4 montre la discrétisation d'un mur en particules lagrangiennes sur un maillage eulérien. La surface du solide est discrétisée en particules, chaque particule agissant sur le fluide comme une frontière. L'intérieur du solide peut aussi être discrétisé, comme le montre la Fig. 4.4, afin d'améliorer l'imperméabilité de l'obstacle. Pour être hermétique, une cellule du maillage eulérien doit contenir au moins une particule.

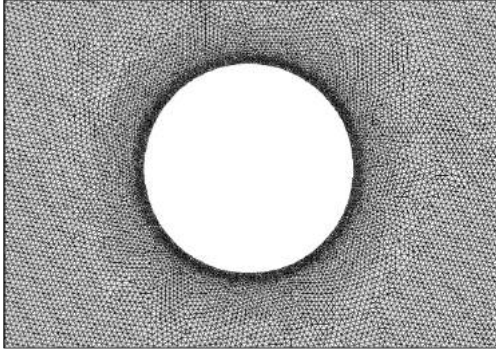


FIGURE 4.3 : Modélisation d'un cylindre immergé : maillage de type "Body Conformal". Le cylindre est explicitement discrétisé.

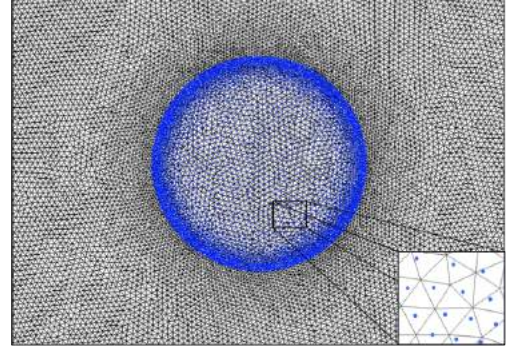


FIGURE 4.4 : Modélisation d'un cylindre immergé avec la méthode IBC : maillage eulérien avec particules lagrangiennes représentant le cylindre.

- Construction d'une méthode IBC sur une formulation de particules lagrangiennes

L'obstacle immergé peut être en mouvement à une vitesse donnée u_p ou à l'arrêt et l'objectif de la méthode IBC est d'imposer localement au fluide la vitesse de la particule : $u_{f@p} = u_p$.

L'interaction entre une particule et le fluide peut être exprimée de différentes manières. Dans cette étude, une force de rappel, initialement proposée par Goldstein et al [84], est utilisée et le terme de forçage f_i^n s'exprime suivant :

$$f_i^n = \beta \int_0^t (u_{p,i}^n - u_{f@p,i}) dt' + \alpha (u_{p,i}^n - u_{f@p,i}) \quad (4.24)$$

où $u_{f@p,i}$ est la $i^{\text{ème}}$ composante de la vitesse du fluide à l'endroit de la particule. α et β sont les paramètres cas dépendants. f_i^n est une simple force de rappel de la vitesse du fluide au niveau de la particule $u_{f@p,i}$, vers la vitesse de la particule u_p . Dans la théorie des systèmes de contrôle, cette approche correspond à un correcteur Proportional-Integral (PI) ayant pour objectif de faire tendre $u_{f@p,i}$ vers $u_{p,i}^n$ à tout moment.

Le problème dans cette formulation se situe dans la détermination des coefficients α and β . En effet, de nombreuses campagnes de tests faites au début de cette thèse ont montré que le choix de leur valeur est très dépendant du cas étudié : si les valeurs sont trop hautes, les termes sources deviennent trop grands et le code diverge, mais si les valeurs sont trop faibles, les termes sources ne sont pas suffisants pour que le mur soit imperméable.

Une nouvelle formulation de f_i^n a été proposée par Bonhomme [85], afin de simplifier l'utilisation de la méthode et de la rendre indépendante du maillage ou de la configuration calculée. L'intensité des termes sources est alors contrôlée par l'utilisateur seulement à travers un temps de relaxation, qui correspond au nombre d'itérations nécessaires pour atteindre l'équilibre entre la vitesse du fluide à la particule et la vitesse de la particule ($u_{f@p} = u_p$). Pour plus de précisions, le lecteur pourra se référer à la [85]. La nouvelle formulation de la force de rappel exercée par la particule sur le fluide s'écrit :

$$f_i^n = \frac{\rho V_m}{M^2 \Delta t^2} \int_0^t (u_{p,i}^n - u_{f@p,i}) dt' + \frac{\rho V_m}{N \Delta t} (u_{p,i}^n - u_{f@p,i}) \quad (4.25)$$

$$\alpha = \frac{\rho V_m}{N \Delta t} \quad (4.26)$$

Dans l'Eq. 4.26, α , associé au correcteur proportionnel, s'exprime à partir d'un temps de relaxation $\tau_P = N \Delta t$ où N correspond au nombre d'itérations, V_m est le volume fictif autour du noeud m et ρ la masse volumique du fluide.

$$\beta = \frac{\rho V_m}{M^2 \Delta t^2} \quad (4.27)$$

Comme pour α , le coefficient β (Eq. 4.27) associé au correcteur intégral s'exprime à partir d'un temps de relaxation $\tau_I = M \Delta t$, où M correspond au nombre d'itérations.

Les entiers N et M sont respectivement les temps de relaxation, en nombre d'itérations, associés au terme source proportionnel et intégral. N doit être supérieur à 1 car le code ne peut imposer en une itération $u_{f@p} = u_p$. De manière générale, N est compris entre 2 et 10. M doit aussi être plus grand que un, mais inférieur au terme proportionnel : l'objectif du terme source intégral est d'appliquer une force moyenne au fluide afin d'assurer la condition de non glissement. M est souvent compris entre 100 et 1000 en pratique, ce qui assure la stabilité tout en conservant en glissement $u_{p,i} - u_{f@p,i}$ faible.

4.3.2 L'approche MISCOG (Multi Instances Solver Coupled on Overlapping Grids)

L'approche MISCOG, développée initialement pour des turbomachines [64, 65] (par exemple pour des calculs d'étage complet de rotor-stator) permet aussi de traiter des composants tournants comme les valves du CVC, et constitue donc une alternative à la méthode IBC. Dans cette approche, deux ou plusieurs instances du même solveur LES sont couplées par le

coupleur parallèle OpenPALM [86, 87], chaque instance ayant son propre domaine de calcul. La méthode est appelée MISCOG (*Multi Instances Solvers Coupled via Overlapping Grids*).

Pour faire tourner des parties mobiles, le code utilise l'approche de maillage mobile [71, 73, 72] : le maillage tourne sans déformation. La difficulté réside dans l'échange des informations à travers les interfaces. La méthode MISCOG consiste en reconstruire les résidus à l'interface à partir d'échanges et d'interpolations linéaires des différentes variables conservatives sur une zone de recouvrement (quelques mailles) commune aux deux maillages.

La Fig. 4.5 illustre la méthode MISCOG dans le cas d'un obstacle cylindrique tournant immergé dans un écoulement : un premier maillage correspond à l'obstacle, un deuxième à l'écoulement, et une zone de recouvrement où se font les échanges d'informations entre les deux maillages. Le maillage tournant est accroché à l'obstacle tournant et tourne avec lui. dans la zone de recouvrement, les deux instances de AVBP échangent leurs résidus pour coupler les codes.

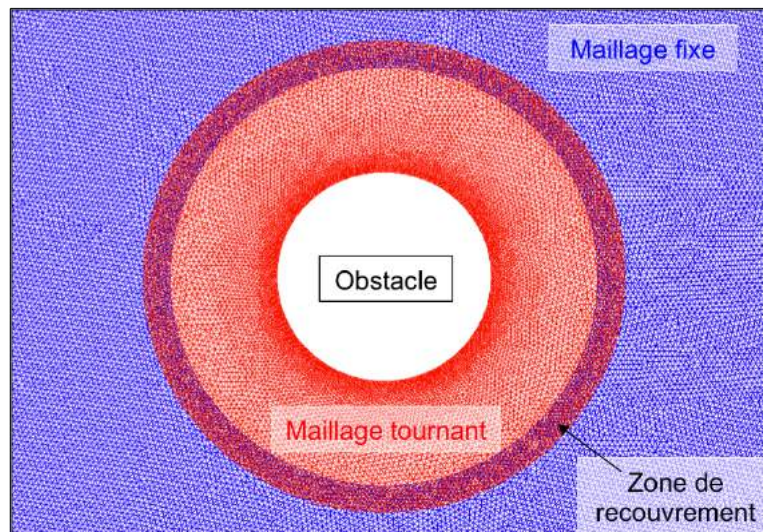


FIGURE 4.5 : Méthode MISCOG.

L'approche MISCOG a été validée sur de nombreux cas académiques afin d'assurer une perte d'information minimale au travers de l'interface [64, 65] et une certaine précision des schémas numériques disponibles avec cette méthode : Lax-Wendroff, qui est un schéma numérique de second ordre en espace et en temps, TTGC et TTG4A qui sont des schémas numériques de troisième ordre en espace et en temps.

Cette méthode présente de nombreux avantages par rapport à la méthode des IBC : pas de problème de diffusion (les obstacles ne sont pas calculés), le paramétrage est plus simple (pas de paramètres PI à déterminer), possibilité de réaliser une étude diphasique dans chaque instance car le module diphasique d'AVBP n'est pas utilisé.

4.3.3 Comparaison des approches IBC et MISCOG

On teste ici les deux approches IBC et MISCOG, décrites précédemment, sur des cas représentatifs d'une chambre CVC et souvent plus difficiles. Pendant un cycle CVC, les valves d'admission et d'échappement voient, durant la combustion à volume constant, des gradients de pression (principe du cycle de Humphrey), de température et d'espèces (formation des gaz brûlés à l'intérieur de la chambre). La méthode numérique utilisée doit donc garantir l'étanchéité des valves en position fermée.

Pour choisir entre IBC et MISCOG, les deux approches ont été testées sur un cas test proche du comportement d'une chambre CVC. La configuration de référence consiste en deux volumes fluides fictifs séparés par une valve de forme cylindrique, comme représenté sur la Fig. 4.6. La perméabilité de l'obstacle est étudiée pour les deux approches, à partir de différentes initialisations (Tab. 4.1) :

1. Différence de pression entre les deux volumes fluides : $P_1 = 1$ bar et $P_2 = 10$ bars.
2. Différence de température entre les deux volumes fluides : $T_1 = 300$ K et $T_2 = 1500$ K.
3. Différence de concentration d'espèces entre les deux volumes fluides :
 - $Y_1 = 1\%$ d'oxygène et 99% d'azote (concentrations massiques),
 - $Y_2 = 99\%$ d'oxygène et 1% d'azote.
4. Double gradient imposé avec P_1 - P_2 combiné à T_1 - T_2 .
5. Double gradient imposé avec P_1 - P_2 combiné à Y_1 - Y_2 .

Les initialisations 4 et 5 se rapprochent ainsi du fonctionnement d'une chambre CVC qui voit lors de la phase de combustion, une augmentation de température, de pression et la formation de gaz brûlés.

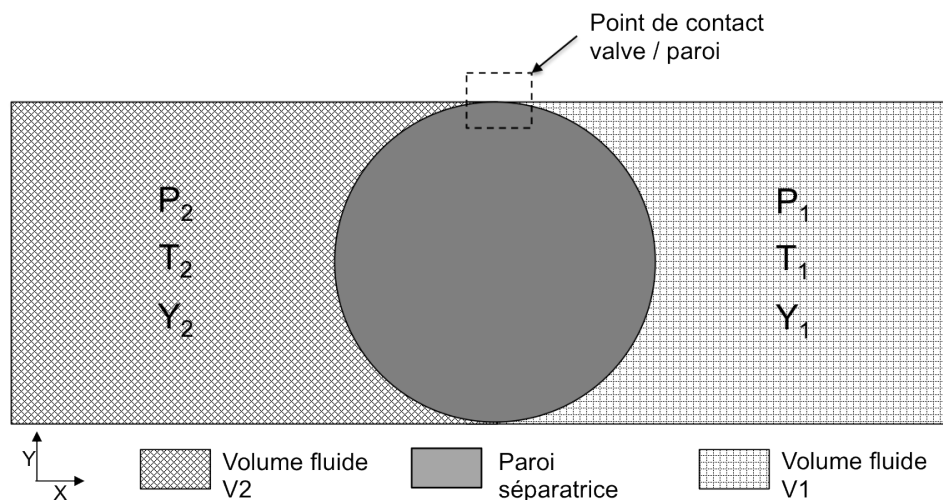


FIGURE 4.6 : Configuration de référence avec les deux volumes fluides séparés par une paroi circulaire.

A partir des initialisations énoncées, une variante est proposée afin de tester la perméabilité de l'obstacle mis en rotation. Ainsi, pour chaque initialisation, une simulation est réalisée avec l'obstacle en position fixe (vitesse de rotation nulle) et une autre avec l'obstacle soumis à une vitesse de rotation (suivant l'axe z) de 100 Hz. L'ensemble des configurations testées est résumé dans la Tab. 4.1.

Tous les calculs sont réalisés avec le schéma numérique Lax-Wendroff (second ordre en espace et en temps), sur 100 ms. Les murs sont adiabatiques.

TABLE 4.1 : *Différentes variations analysées*

Initialisation	Vitesse de rotation de la paroi	Volume fluide V2	Volume fluide V1
1	0 Hz	P2	P1
	100 Hz	P2	P1
2	0 Hz	T2	T1
	100 Hz	T2	T1
3	0 Hz	Y2	Y1
	100 Hz	Y2	Y1
4	0 Hz	P2	P1
		T2	T1
	100 Hz	P2	P1
		T2	T1
5	0 Hz	P2	P1
		Y2	Y1
	100 Hz	P2	P1
		Y2	Y1

- Mise en place du calcul avec la méthode IBC

La mise en place du calcul avec la méthode IBC est illustrée sur la Fig. 4.7. Le domaine fluide est entièrement maillé, l'obstacle cylindrique est discrétisé par des particules lagrangiennes, l'ensemencement de particules est plus important au niveau de la paroi de l'obstacle afin d'améliorer son imperméabilité. Les correcteurs Proportionnel (β) et Intégral (α) choisis pour ce cas test sont : $\beta = 2$ et $\alpha = 10^3$.

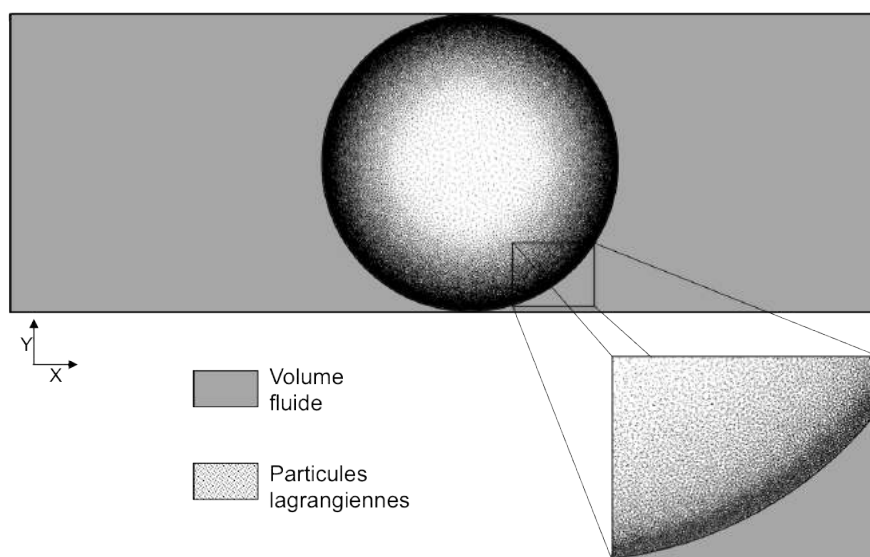


FIGURE 4.7 : Mise en place du calcul avec la méthode IBC.

- Mise en place du calcul avec la méthode MISCOG

La mise en place du calcul avec la méthode MISCOG est illustrée sur la Fig. 4.8. Une instance fixe, correspondant au volume fluide, est couplée à une instance mobile qui modélise la paroi séparatrice cylindrique. La zone de recouvrement (*overlapping zone*) où se font les échanges d'informations entre les deux instances est représentée sur la Fig. 4.8.

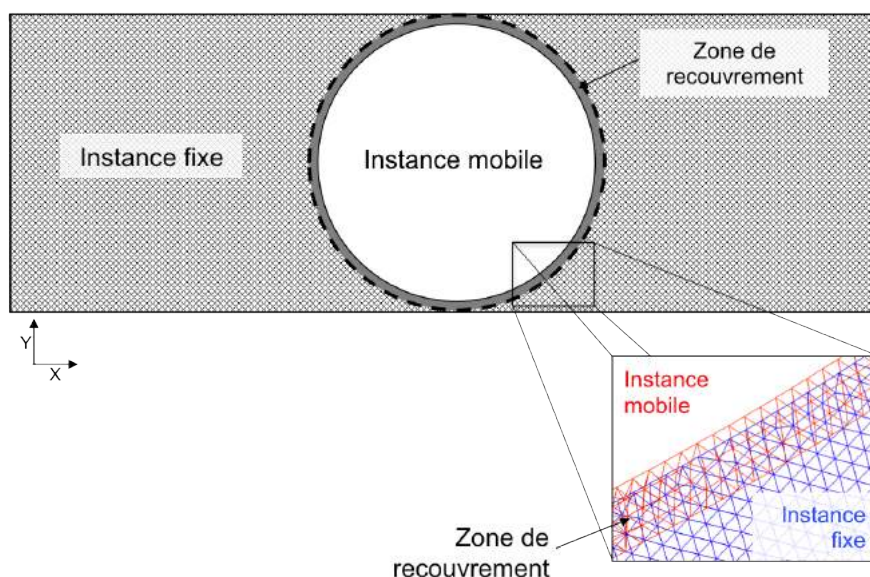


FIGURE 4.8 : Mise en place du calcul avec la méthode MISCOG.

1. Résultats pour le gradient de pression P2-P1

L'évolution de pression dans le volume fluide V2 est illustrée dans la Fig. 4.9 pour les deux cas testés : obstacle à l'arrêt (0 Hz) et obstacle en rotation (100 Hz). A vitesse de rotation nulle, après 20 ms, la pression chute de 3 bars pour IBC alors que MISCOG affiche une chute inférieure à 1 bar. Lorsque l'obstacle est mis en rotation à 100Hz, la méthode MISCOG semble également être plus étanche que la méthode IBC : chute de 2.5 bars de pression en 20 ms pour MISCOG contre 4 bars pour la méthode IBC.

Le constat de la Fig. 4.9 est délicat. En théorie, aucune fuite ne devrait avoir lieu et donc la pression P_2 devrait être constante au cours du temps. En fait, les deux méthodes "fuient" légèrement car ce cas est très exigeant. Pour IBC, la fuite vient du fait que près du mur, seules quelques cellules et particules imposent le flux nul. Dans le cas de MISCOG, par construction, il existe une zone de fuite où le passage n'est pas totalement bloqué. La zone de recouvrement (Fig. 4.8) n'est jamais fermée et une petite fuite peut toujours y avoir lieu. On peut minimiser cette fuite en ajoutant des mailles pour réduire la taille de la zone de recouvrement.

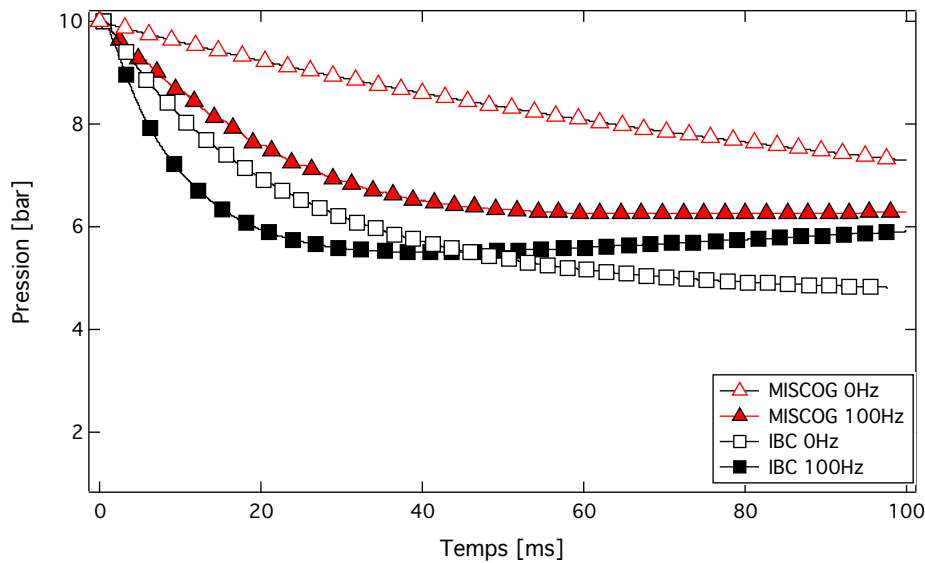


FIGURE 4.9 : Cas P2P1 : évolution de la pression P_2 dans le volume fluide V2 pour les deux vitesses de rotation 0Hz et 100Hz.

En pratique, dans une chambre CVC, les phases où les soupapes sont fermées ne dépassent pas quelques millisecondes et la perte de pression reste donc faible avec les deux méthodes. On note cependant qu'aucune des deux méthodes n'est parfaite et n'offre une fermeture totale. Cela dit, le dispositif expérimental présente aussi de fortes fuites. Ceci est dû à la configuration particulière de la came qui vient fermer le passage sur une zone de contact très étroite entre came et mur (Fig. 4.10). C'est clairement un point difficile pour toute méthode numérique.

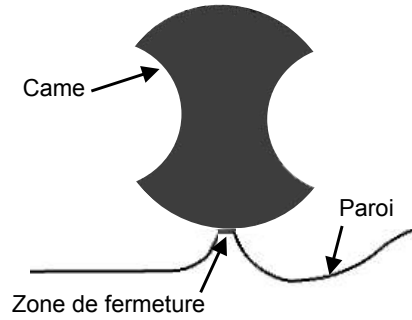


FIGURE 4.10 : Zone de contact entre une came et la paroi de la chambre.

2. Résultats pour le gradient de température T2-T1

Concernant le cas avec gradient de température ($T_2 = 1500$ K à gauche contre $T_1 = 300$ K à droite de l'obstacle), les résultats sont présentés sur la Fig. 4.11, qui donne la température moyenne dans le volume fluide V2. La méthode IBC montre des limites de perméabilité, particulièrement quand l'obstacle est mis en rotation. L'approche MISCOG présente une chute de température semblable à la méthode IBC après 50 ms de calcul (100 K). Cette chute pour MISCOG est due aux fuites existantes au niveau des zones de dialogue, qui peuvent être minimisées avec un raffinement de maillage. Ces pertes restent faibles dans un cas CVC réel.

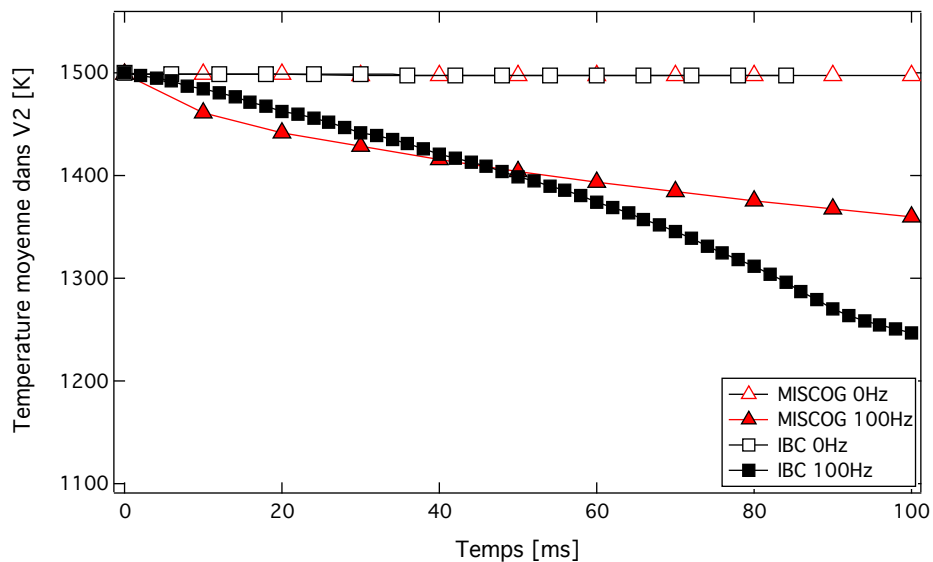


FIGURE 4.11 : Cas T2-T1 : évolution de la température T2 dans le volume fluide V2 pour les deux vitesses de rotation 0Hz et 100Hz.

3. Résultats pour le gradient de concentration d'espèces Y2-Y1

Pour cette configuration, le domaine fluide a été initialisé avec un écart de concentration d'espèces entre les deux volumes V1 et V2. La Fig. 4.12 représente la fraction massique moyenne d'oxygène dans le volume fluide V2. Les résultats montrent que les deux méthodes ont des bons comportements quand la paroi est à l'arrêt et aucun flux d'espèce ne passe à travers la soupape. Par contre, la mise en rotation de la paroi dégrade légèrement les résultats pour chacune des méthodes avec une perte de 4% de concentration massique d'oxygène. La diffusion des espèces à travers les particules lagrangiennes censées bloquer l'écoulement est d'autant plus important quand l'obstacle est en rotation.

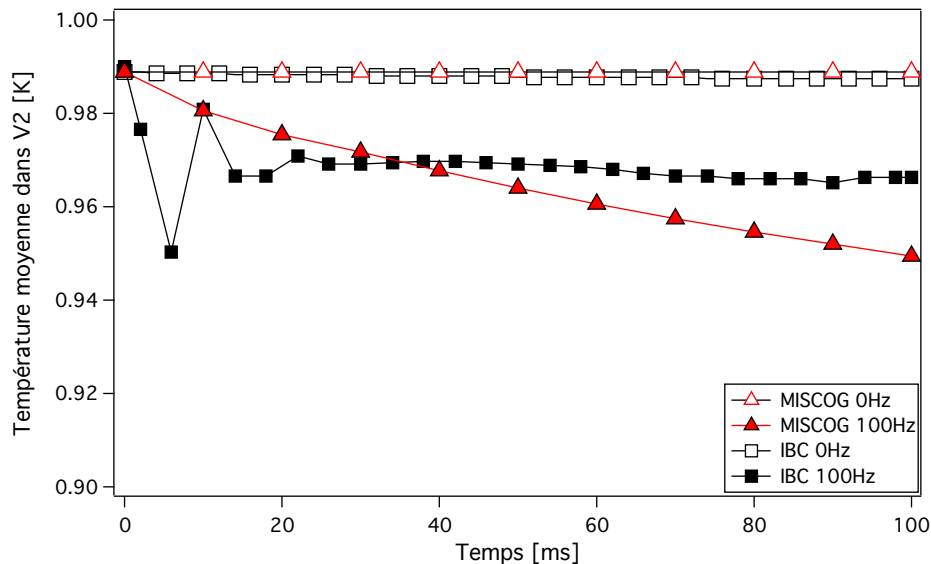


FIGURE 4.12 : Cas Y2-Y1 : évolution de la concentration d'oxygène Y2 dans le volume fluide V2 pour les deux vitesses de rotation 0Hz et 100Hz.

Ces trois premiers cas testés ne sont pas suffisamment discriminants pour l'une des deux méthodes. L'approche MISCOG semble donner de meilleurs résultats pour l'écart de pression lorsque la paroi séparatrice est en rotation : chute de 2.5 bars pour MISCOG contre 4 bars avec IBC après des temps beaucoup plus longs que les temps caractéristiques du CVC. Mais les résultats obtenus avec IBC et MISCOG sont proches lorsqu'on analyse les cas initialisés avec un écart de température ou un écart de concentration d'espèces.

Les initialisations 4 et 5 sont étudiées afin de tester les méthodes sur une configuration proche du fonctionnement du thermoréacteur : lorsque la combustion a lieu dans la chambre, les cames en position fermée voient dans le même temps une augmentation de température, de pression (combustion isochore) et une variation de concentration d'espèces (formation des gaz brûlés dans la chambre en opposition aux gaz frais en amont des cames d'admission). Les initialisa-

tions sont rappelées dans la Tab. 4.1 :

- L'initialisation n°4 consiste donc en un écart de température (T_2-T_1) et de pression (P_2-P_1) entre les deux volumes fluides.
- Dans l'initialisation n°5, les deux volumes fluides sont initialisés à des pressions différentes (P_2-P_1) et à des concentrations différentes (Y_2-Y_1).

Comme pour les initialisations 1 à 3 (Tab. 4.1), les calculs sont réalisés pour une paroi à l'arrêt (0 Hz) et en rotation (100 Hz). Le temps physique de calcul est limité à 20 ms, qui correspond à la durée d'un cycle CVC de thermoréacteur pour une vitesse de rotation de 1500 tr/min.

4. Résultats obtenus à partir du double gradient : pression P_2-P_1 et écart de température T_2-T_1

La Fig. 4.13 montre l'évolution de la pression dans le volume fluide V2 (initialisé à 10 bars et 1500 K). A l'arrêt, IBC fuit légèrement plus que MISCOG (2 bars perdus en 20 ms contre 1.5 bars). Lorsque l'obstacle est en rotation, le constat est similaire qu'à l'arrêt, IBC fuit plus que MISCOG.

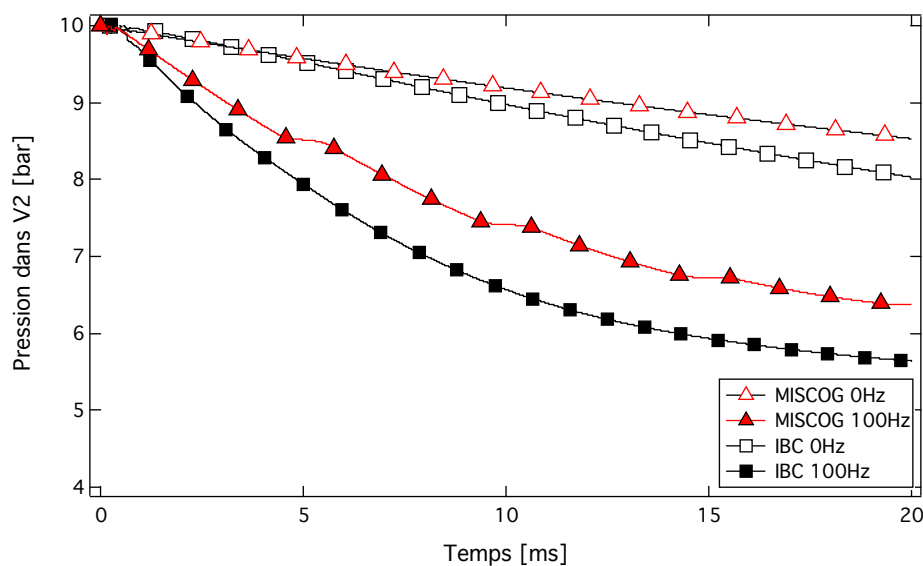


FIGURE 4.13 : Cas double gradient P_2-P_1 et T_2-T_1 : évolution de la pression P_2 dans le volume fluide V2 pour les deux vitesses de rotation 0Hz et 100Hz

La Fig. 4.14 montre l'évolution de la température moyenne dans le volume fluide V2. Bien que les résultats soient relativement proches lorsque l'obstacle est à l'arrêt, la méthode MISCOG semble plus adaptée quand l'obstacle est en rotation : chute de 150 K pour MISCOG contre 300 K pour IBC.

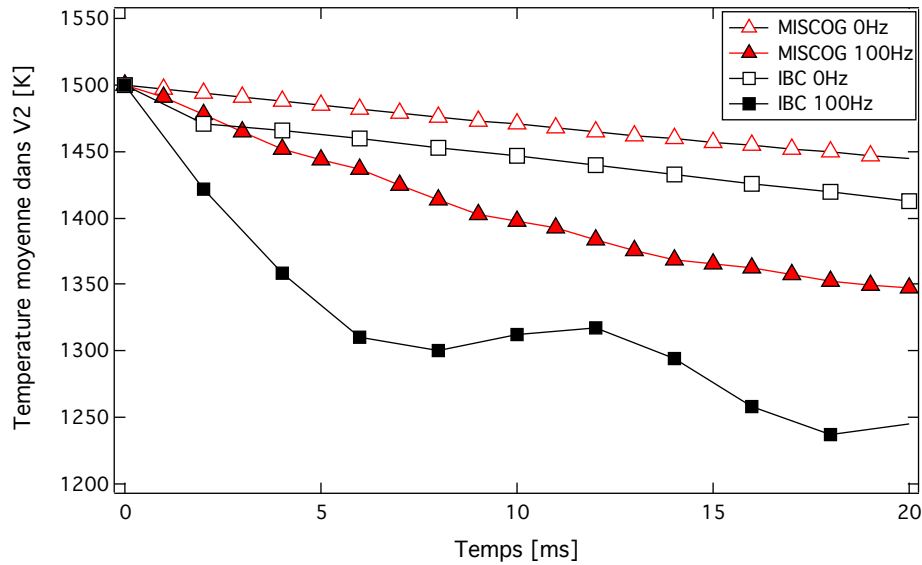


FIGURE 4.14 : Cas double gradient $P2-P1$ et $T2-T1$: évolution de la température moyenne $T2$ dans le volume fluide $V2$ pour les deux vitesses de rotation 0Hz et 100Hz .

5. Résultats obtenus à partir du double gradient pression $P2-P1$ et espèces $Y2-Y1$

La Fig. 4.15 illustre l'évolution de la pression dans le volume 1 (initialisé à 10 bars et avec 99% de concentration massique d'oxygène). IBC et MISCOG ont des résultats similaires dans chaque cas, avec une chute de pression plus importante quand la soupape est en rotation.

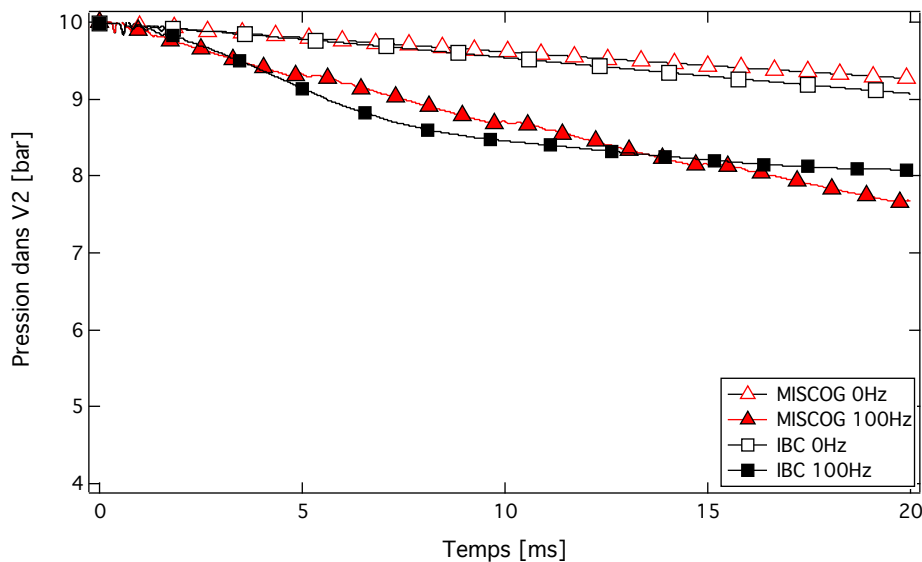


FIGURE 4.15 : Cas double gradient $P2-P1$ et $Y2-Y1$: évolution de la pression $P2$ dans le volume fluide $V2$ pour les deux vitesses de rotation 0Hz et 100Hz .

La Fig. 4.16 montre l'évolution de la concentration massique d'oxygène dans le volume fluide V2 au cours des 20 ms de temps de calcul. La méthode MISCOG présente une nouvelle fois de meilleurs résultats que la méthode IBC. La diffusion des espèces à travers les particules lagrangiennes est accentuée par l'écart de pression.

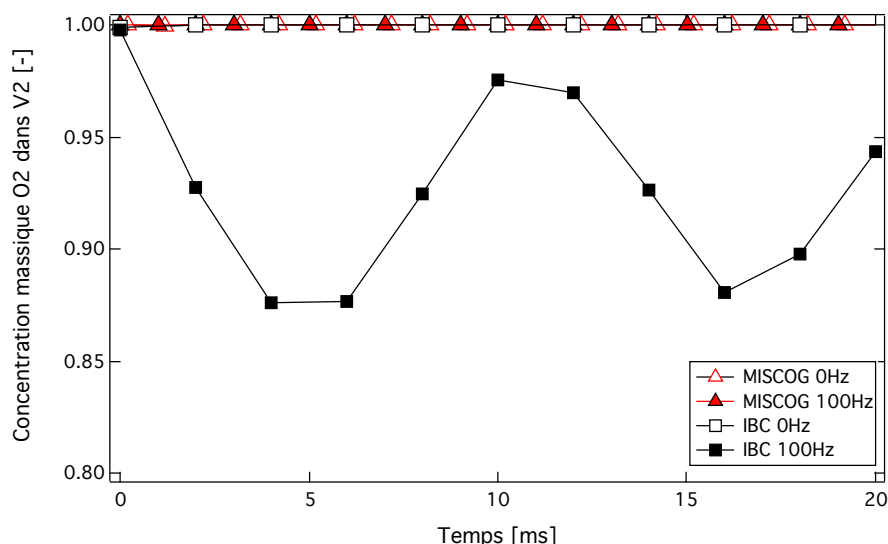


FIGURE 4.16 : Cas double gradient P2-P1 et Y2-Y1 : évolution de la concentration d'oxygène Y2 dans le volume fluide V2 pour les deux vitesses de rotation 0Hz et 100Hz.

Une question intéressante est de considérer le coût de calcul relatif à chacune des méthodes. Pour ce cas test (on prend l'initialisation 5 comme exemple), les calculs IBC et MISCOG ont été lancés sur le même nombre de processeurs (128) et le temps physique calculé est de 20 ms. Pour IBC, l'ensemencement en particules de l'obstacle est relativement important puisque il compte plus de 300 000 particules. Comme le montre la Tab. 4.2, MISCOG est deux fois plus rapide que IBC pour cette configuration. La méthode la plus précise s'avère aussi la plus rapide.

TABLE 4.2 : Comparaison des temps de calcul entre les deux méthodes IBC et MISCOG.

	IBC	MISCOG
Nombre de tétraèdres	2 860 000	2 160 000
Nombre de particules lagrangiennes	300 000	X
Nombre de processeurs	128	128
Temps physique calculé [ms]	20	20
Temps CPU [h]	1530	690

En résumé de ce chapitre :

- La simulation aux grandes échelles (LES) semble pertinente pour le calcul de chambre CVC type thermoréacteur. Elle a largement été utilisée pour les moteurs à pistons [88, 22, 23] au cours de ces dernières années, notamment intéressante pour sa capacité à reproduire des phénomènes instationnaires comme des variations cycle à cycle, qu'une méthode RANS ne peut reproduire. Ces variations cycle à cycle sont rencontrées dans les moteurs à pistons, mais ont également été mises en évidence au cours des essais expérimentaux réalisés sur le thermoréacteur au laboratoire Pprime.

- De plus, le code AVBP propose différentes méthodes numériques capables de gérer des obstacles mobiles. Les méthodes ALE utilisées pour des mouvements de pièce en translation (mouvement du piston pour les moteurs automobiles par exemple) ne sont pas applicables dans notre étude car la déformation de maillage qu'implique cette méthode dans le cas d'obstacle en rotation (cames) n'est pas acceptable. Deux autres méthodes numériques sont possibles : la méthode IBC et la méthode MISCOG.

La méthode numérique choisie pour réaliser les simulations numériques 3D du thermoréacteur est donc MISCOG. Pour cette configuration de chambre CVC, elle est plus adaptée que la méthode des frontières immergées qui présente notamment un problème de diffusion (de température et d'espèces) à travers les particules lagrangiennes (voir Sec. 4.3.3). En effet, la méthode IBC n'agit que sur l'équation de quantité de mouvement et n'a aucune action sur la diffusion. Le paramétrage des correcteurs Proportionnel-Intégral de la méthode IBC s'est également révélé compliqué quand les conditions d'écoulement sont plus critiques : gradient de pression plus important entraînant de fortes vitesses à l'ouverture des cames, température de fin de combustion de l'ordre de 2500K menant à une diffusion de la chaleur à travers le cames depuis les gaz chauds vers les gaz frais.

Chapitre 5

Calculs LES 3D non réactifs

Sommaire

5.1	Mise en place du calcul - MISCOG.....	76
5.2	Analyse des cycles à froid obtenus expérimentalement et par la LES.....	81
5.2.1	Moyennes de phase	85
5.3	Détermination des paramètres du modèle 0D	87
5.3.1	Détermination du coefficient de décharge Cd.	87
5.3.2	Détermination des temps et vitesses caractéristiques pendant la fermeture des soupapes.	93
5.4	Comparaison CVC0D avec résultats expérimentaux et LES sur un cas non réactif : OP1.....	96

Ce chapitre se focalise sur les écoulements dans le thermoréacteur en l'absence de combustion et présente les calculs LES de la chambre CVC effectués avec la méthode MISCOG (choisie au Chap. 4) dans des cas choisis parmi la base de données construite à Poitiers par le laboratoire Pprime.

La Sec. 5.1 montre comment le calcul de la configuration réelle du thermoréacteur a été mis en place. Deux types de calculs sont alors effectués :

- la Sec. 5.2 montre des calculs LES de cycles successifs sans combustion pour un régime de 1200 tr/min. AVBP permet de calculer des dizaines de cycles successifs et de les comparer avec les résultats expérimentaux en termes de pression au cours du temps. La LES fournit aussi les champs complets de vitesse et permet d'observer les variations cycle à cycle qui s'avèrent assez faibles dans ce cas non réactif (contrairement au cas avec combustion comme nous le verrons au Chap. 6, ce qui suggère que c'est bien la combustion qui induit les plus fortes variations entre cycles successifs).

- la Sec. 5.3 présente les calculs effectués pour caler les constantes inconnues du modèle 0D du chapitre 3. Deux catégories de calculs sont utilisés :

- On montre tout d'abord comment évaluer les coefficients de décharge C_d des rideaux de soupapes d'admission et d'échappement à partir de calculs stationnaires (MISCOG est désactivé) où la soupape ne bouge pas. Ces cas sont l'équivalent des bancs volutes utilisés pour caractériser la perméabilité des culasses dans les moteurs à piston où l'on établit un écoulement stationnaire autour des soupapes pour mesurer précisément les valeurs des coefficients C_d .
- On utilise ensuite une LES semblable à celle de la Sec. 5.2, donc un calcul non réactif de cycles consécutifs. L'objectif de ce calcul est de trouver comment exprimer la vitesse U qui est employée à la fois pour évaluer les pertes de chaleur (Eq. 3.44) et le taux de combustion dans le modèle EBU dans la phase où la flamme est turbulente (Eq. 3.66). Cette évaluation est faite en traçant le module de la vitesse dans la chambre qui est supposée être une bonne évaluation de la vitesse U nécessaire à la fois pour les corrélations thermiques et pour le modèle EBU. Cette vitesse ne fait que décroître pendant que les soupapes sont fermées et le temps caractéristique de cette décroissance peut être mesuré dans la LES pour être ensuite employé dans le modèle 0D. Ce temps caractéristique ne dépend que de la forme de la chambre puisque celle-ci n'est affectée par aucune entrée ou sortie pendant cette phase. Il peut donc être utilisé pour tous les cas étudiés dans CVC0D. Bien sûr, si une autre chambre devait être employée, il faudrait répéter la LES mais à géométrie constante, un calcul LES isolé est suffisant pour évaluer ce temps de décroissance.

5.1 Mise en place du calcul - MISCOCG

Dans le cas du thermoréacteur, l'approche MISCOCG consiste à coupler 5 instances du même solveur LES (ici AVBP). Le domaine calculé (1^{ère} instance : AVBP01) est couplé avec les 4 cames rotatives chacune représentée par une instance différente (AVBP02 à AVBP05). La Fig. 5.1 montre les 5 instances couplées. Les Figs. 5.2 et 5.3 permettent de visualiser une des zones de dialogue (zone de recouvrement), où se font les échanges d'informations entre l'instance mobile (came d'échappement sur la Fig. 5.3) et l'instance principale (fixe).

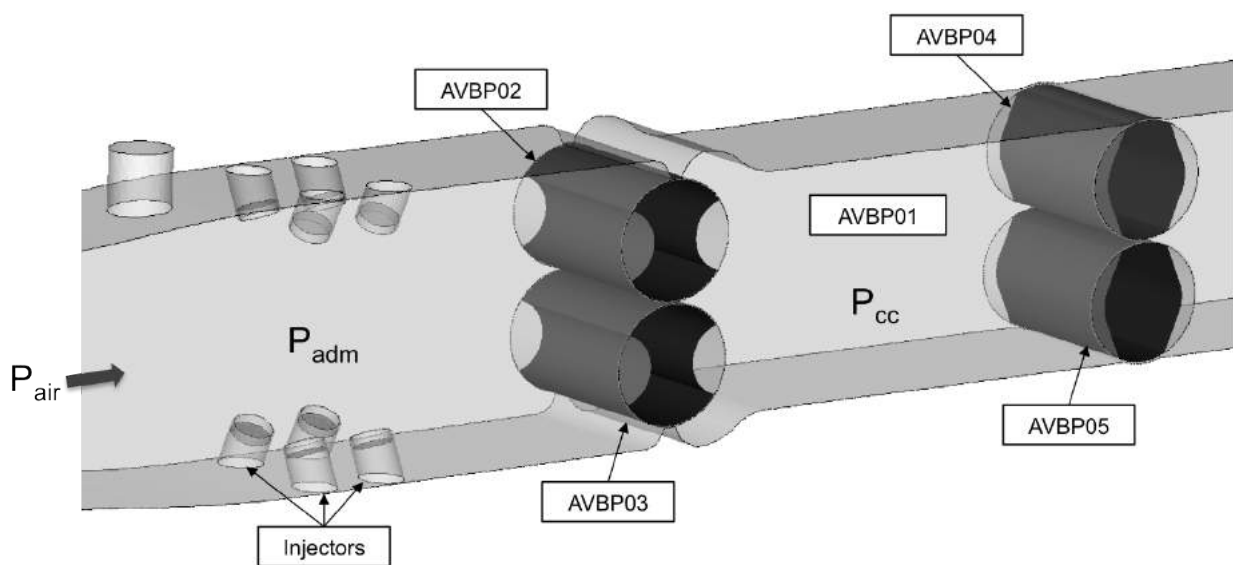


FIGURE 5.1 : MISCOCG : vue d'ensemble des 5 instances couplées (AVBP01 à AVBP05).

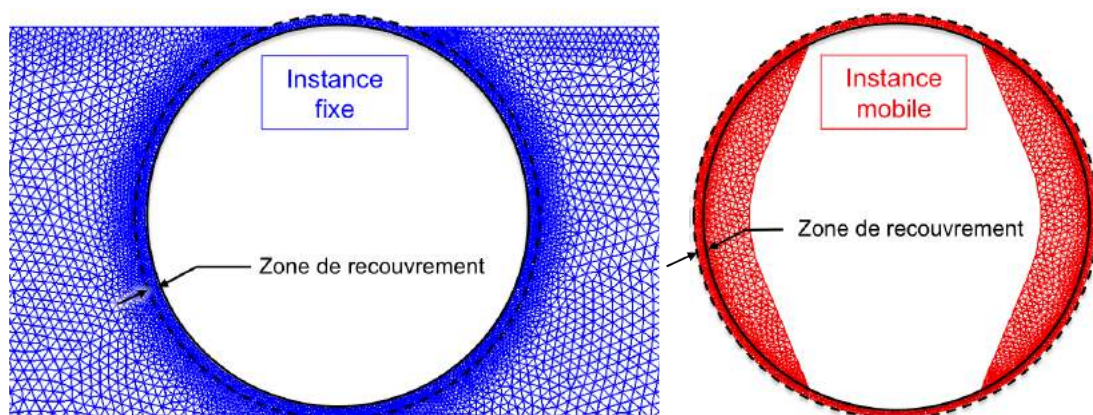


FIGURE 5.2 : MISCOCG : zone de recouvrement. Vue de gauche : instance fixe. Vue de droite : instance mobile.

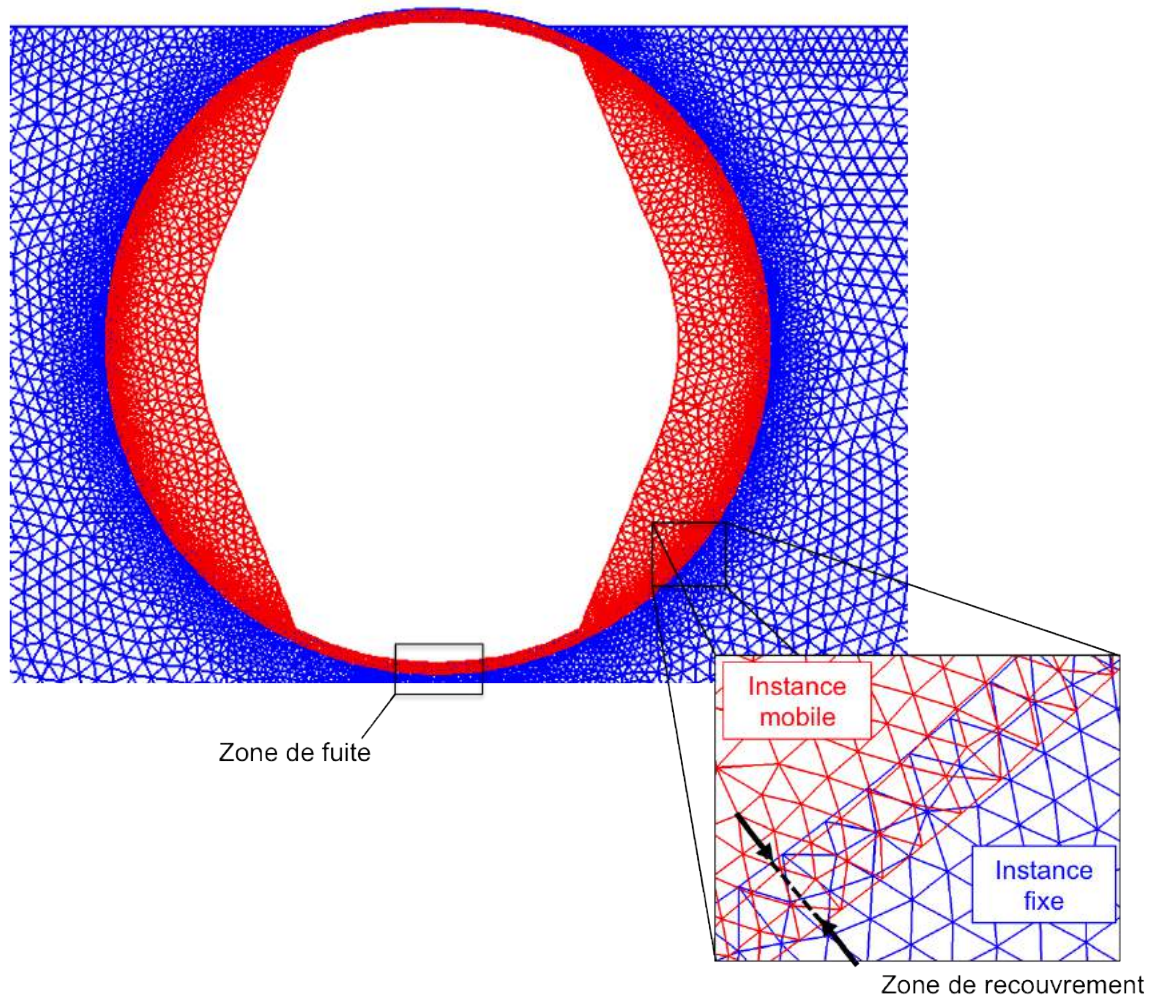


FIGURE 5.3 : MISCOG : zone de recouvrement. Les maillages de l'instance fixe et de l'instance mobile sont superposés pour visualiser la zone de recouvrement.

La Fig. 5.4 représente le maillage de l'instance principale. La simulation numérique comprend chaque élément du banc expérimental. Le réservoir d'air comprimé est relié à la chambre de carburation par l'intermédiaire d'un conduit d'admission. Cette chambre de carburation est séparée de la chambre de combustion par les cames d'admission. Un conduit d'échappement dirige les gaz sortant de la chambre de combustion vers un réservoir aval, qui modélise la sortie atmosphérique de l'expérience.

La Fig. 5.5 est une coupe réalisée au centre de la chambre de combustion, elle permet de visualiser les zones où le maillage a été raffiné : au niveau de la zone d'allumage (cette partie de la simulation est expliquée dans le chapitre suivant), au niveau des zones de recouvrement et de dialogue avec les instances mobiles.

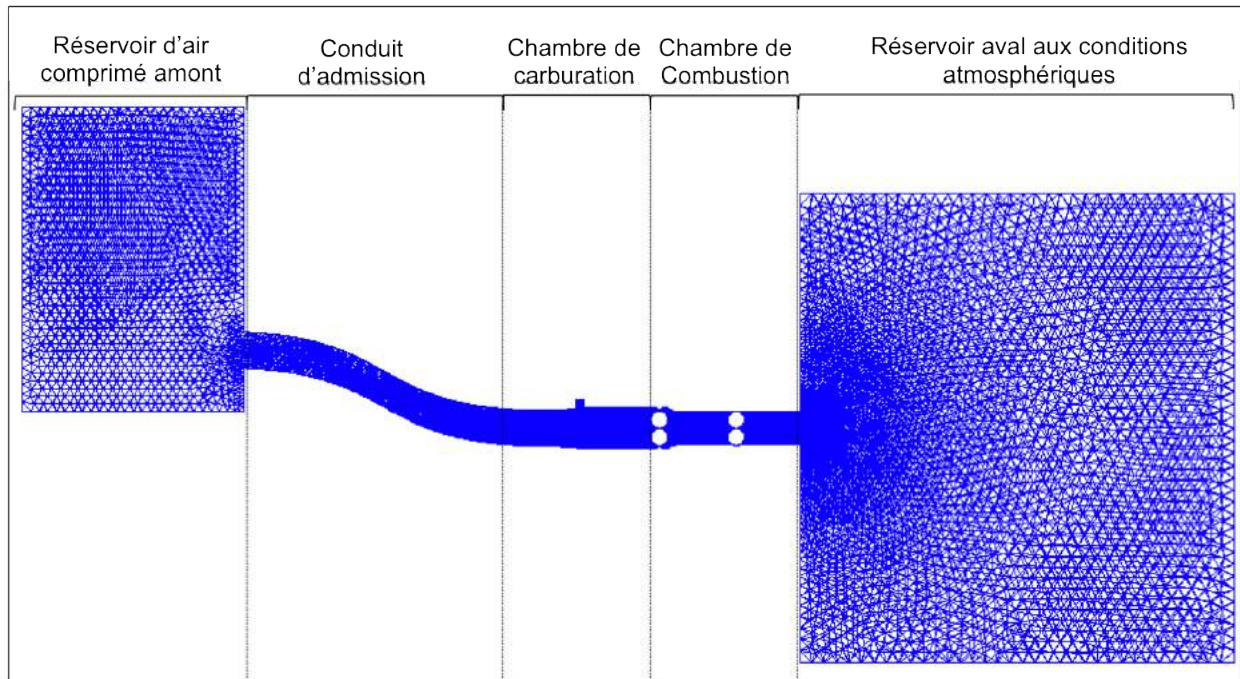


FIGURE 5.4 : Coupe du maillage de l'instance principale AVBP01 qui gère l'ensemble des domaines fixes de la simulation. Les différentes parties du banc d'essai sont représentées.

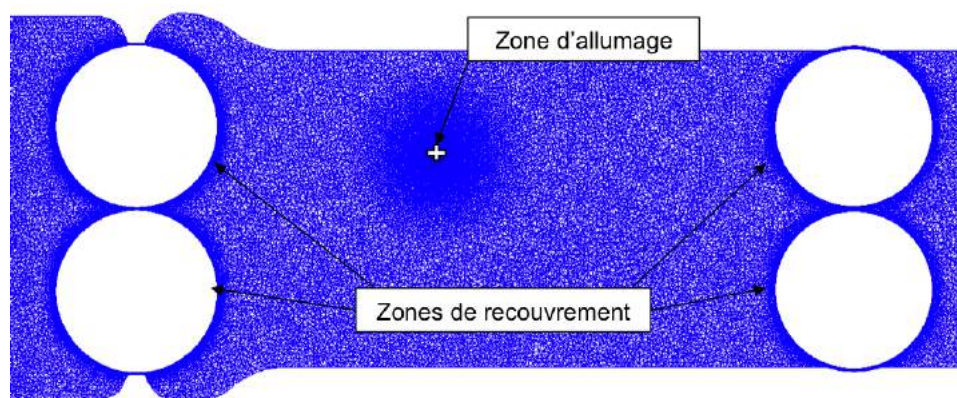


FIGURE 5.5 : Zoom sur le maillage au niveau de la chambre combustion.

Les Fig. 5.6 et 5.7 présentent les maillages des cames d'admission et d'échappement. De même que dans l'instance principale, les zones de dialogue dans les instances mobiles sont particulièrement raffinées avec des tailles de mailles de l'ordre de 0.2mm. Dans le cas du thermoréacteur, le maillage de ces zones de dialogue est crucial pour la validation de la méthode. En effet, comme le montrent les Fig. 5.2 et 5.3, la zone d'échange entre l'instance fixe et une instance mobile revient à imposer une (petite) fuite numérique au niveau des fermetures des cames d'admission et d'échappement puisqu'il existe une petite zone où le fluide peut passer, par construction. Ces zones nécessitent donc d'être aussi petites que possible. Comme il faut mettre au moins deux rangées de cellules dans la zone de recouvrement, ceci passe par une diminution de la taille de maille, ce qui entraîne une augmentation du temps de calcul. Cette limite intrinsèque de MISCOG n'est en général pas un problème car l'expérience, elle aussi, a des fuites pour la même raison (à cause des jeux). Cette question est étudiée dans le Chap. 4 à travers des tests élémentaires.

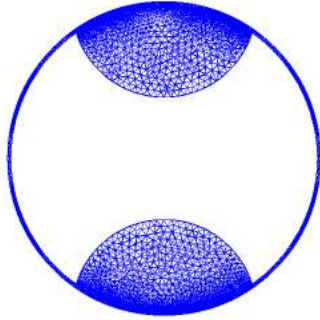


FIGURE 5.6 : Maillage came admission

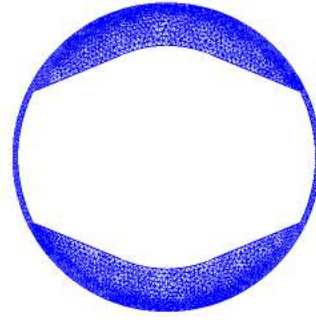


FIGURE 5.7 : Maillage came échappement

Une autre zone importante est la zone où l'injection de carburant gazeux est effectuée (8 injections). Afin d'injecter le débit de carburant adéquat à travers les injecteurs positionnés dans la chambre de carburation, le maillage sur cette zone est également raffiné comme le montre la Fig. 5.8 qui présente une coupe réalisée au centre de la chambre de carburation où l'on voit 4 des 8 injecteurs utilisés pour l'injection du carburant.

Dans l'expérimentation de Pprime, le carburant est injecté sous forme liquide, à travers les 8 injecteurs phasés comme décrit dans la Fig. 2.12. Dans la LES, il est injecté sous forme gazeuse avec le même phasage que dans l'expérimentation. Remplacer une injection diphasique par un jet gazeux est un choix de modélisation qui nécessite de faire des hypothèses arbitraires. Bien sûr, on conserve le débit total massique injecté et sa variation dans le temps. De plus, ici, on a supposé que les gouttes de carburant liquide s'évaporent instantanément pour produire un jet gazeux sur une aire plus grande. Ainsi, la section des injecteurs (Fig. 5.8) et la vitesse du jet gazeux sont choisis pour conserver le débit massique de carburant par cycle $\dot{m}_{fuel}$ (Tab. 5.1).

TABLE 5.1 : Caractéristiques d'injection de l'isooctane

	Liquide (Pprime)	Gaz (LES)
Débit massique par injecteur [kg/s]	0.0087	0.0087
Masse volumique C8H18 [kg/m ³]	750	13.7
Section d'un injecteur [cm ²]	0.005	1.2
Vitesse d'injection [m/s]	23	5.3

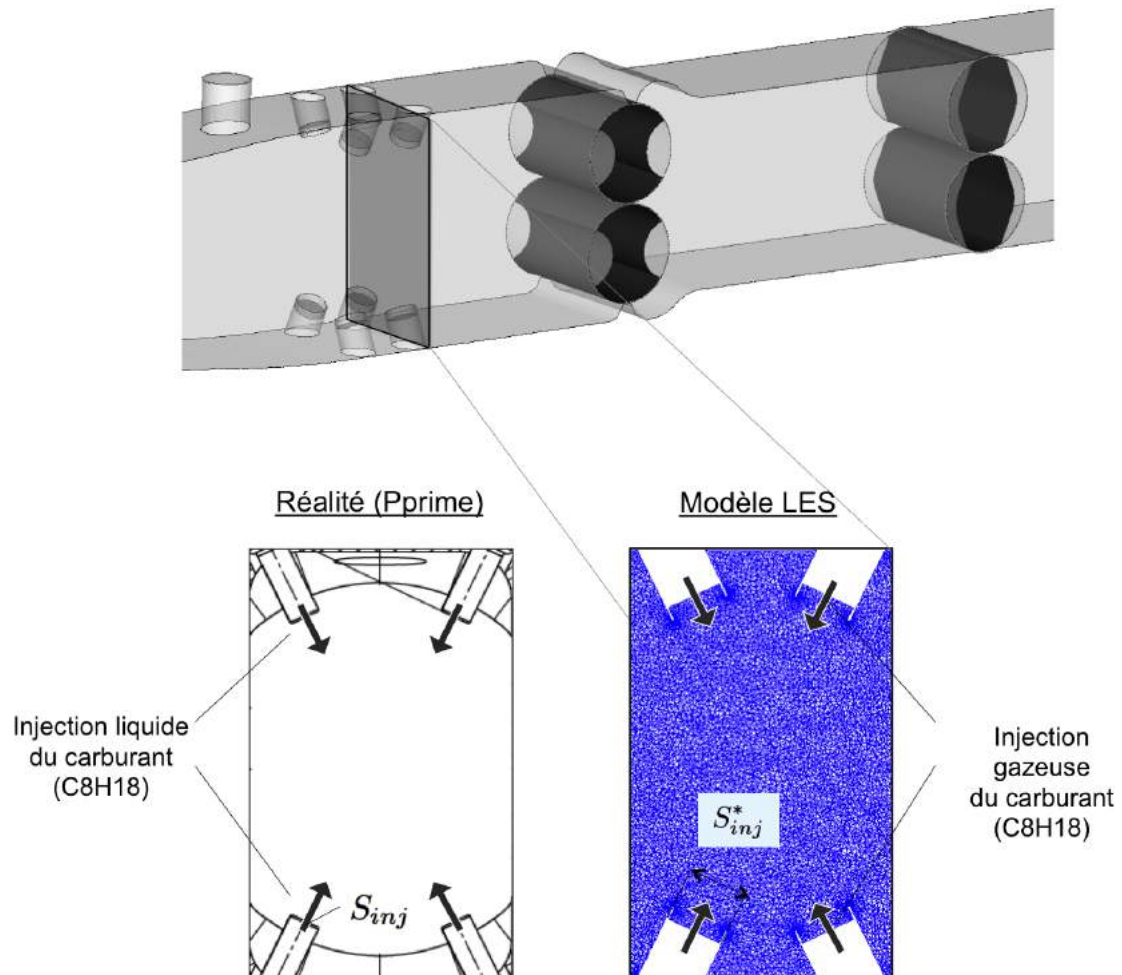


FIGURE 5.8 : Coupe du maillage dans la chambre de carburation : visualisation de 2 paires d'injecteurs de carburant.

Le nombre total de processeurs utilisé sur la machine de production (une machine BULL : Occigen) pour chaque simulation du thermoréacteur est de 1080, la répartition des coeurs de calcul pour chacune des instances est donnée dans la Tab. 5.2. L'équilibrage d'un calcul multi instances est une tâche délicate. Ici, cette distribution a été obtenue par tests successifs. Elle permet de faire un cycle complet non réactif en 27000 heures CPU total correspondant à un temps 'elapsed' de 25 heures. Pour un cycle réactif, il faut compter 43000 heures CPU total, soit un temps réel de 40 heures.

TABLE 5.2 : Détails des cinq maillages utilisés

	AVBP01	AVBP02	AVBP03	AVBP04	AVBP05
Nombre de noeuds	5 518 000	1 076 200	1 076 200	356 000	356 000
Nombre de processeurs	720	120	120	60	60

Les conditions limites à l'entrée et à la sortie du domaine de calcul sont imposées avec le formalisme NSCBC (*Navier Stokes Characteristics Boundary Conditions*) proposé par Poinot et Lele [89] puis amélioré par Granet *et al.* [90].

Les parois du domaine sont modélisées par des murs non glissants. Le transfert de chaleur à travers les parois est modélisé par un flux thermique noté $\Phi = (T_{wall} - T_{ref})/\mathcal{R}_{th}$ où T_{ref} est la température target et $\mathcal{R}_{th}$ la résistance thermique. Pour approcher le flux local relevé expérimentalement, on fixe $\mathcal{R}_{th} = 1.0e-4$ W/K/m² et $T_{ref} = 400$ K. En pratique, ce choix de paramètres implique que les parois internes de la chambre sont quasiment isothermes à $T = 400$ K.

5.2 Analyse des cycles à froid obtenus expérimentalement et par la LES

La Tab. 5.3 résume l'ensemble des points de fonctionnement calculés durant la thèse. Il s'agit d'un nombre de points (3) très réduit par rapport à la base de données expérimentales où des dizaines de points de fonctionnement ont été testés. Cette remarque illustre les limites de la LES : il est possible d'analyser finement un ou deux points de fonctionnement mais faire tous les cas testés expérimentalement était impossible.

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser au cas non réactif OP1. Il correspond à l'essai expérimental 241 fourni par le laboratoire Pprime. Les deux autres points de fonctionnement OP2 et OP3 seront analysés dans le Chap. 6.

Pour OP1, la vitesse de rotation des cames amont et aval est de 1200 tr/min, et le phasage des cames est égal à $\psi = 35.3$ deg (Fig. 2.12). Les conditions thermodynamiques au niveau du réservoir d'admission sont fixées à 3 bars et 120°C, la pression de sortie est égale à la pression atmosphérique (1 bar).

Dans un premier temps, les cycles ont été simulés et comparés à l'expérience en conditions non-réactives. Les paramètres de ce point de fonctionnement, noté OP1, sont les suivants : $T_{air} = 120^\circ\text{C}$, $f = 40$ Hz ($N = 1200$ rpm).

Pour présenter les résultats, la pression sera normalisée par la pression dans le réservoir amont, P_{air} , et les sections d'admission et d'échappement seront normalisées par leurs valeurs maximales. Deux pressions sont considérées ici : la pression dans la chambre de carburation P_{adm} et la pression dans la chambre de combustion P_{cc} (Fig. 5.1).

TABLE 5.3 : Points de fonctionnement fournis par le laboratoire Pprime.

Point de fonctionnement [-]	Vitesse de rotation [rpm]	Phasage ψ [deg]	Cas réactif [-]	Température réservoir amont [°C]	Pression réservoir amont [-]	Pression de sortie [-]
OP1	1200	35.3	No	120	3	1
OP2	1200	35.3	Yes	120	3	1
OP3	1500	35.3	Yes	120	3	1

La Fig. 5.9 montre que les variations de la pression dans la chambre de carburation P_{adm} sont correctement prédites par le code LES. On note que la pression P_{adm} normalisée par la pression amont P_{air} varie de 0.85 à 1.05 et peut donc dépasser 1 à cause des instationnarités de l'écoulement. Comme dans un moteur à piston, il est possible d'augmenter le remplissage en jouant sur l'accord acoustique entre chambre et échappement. Ceci n'a pas été exploité pour le moment et le résultat obtenu (une valeur maximum de P_{adm}/P_{air} de 1.05) est fortuit. Il dépend fortement des caractéristiques acoustiques de l'admission.

La Fig. 5.10 montre que la pression normalisée dans la chambre de combustion, P_{cc}/P_{air} , décroît de sa valeur maximale ($P_{cc}/P_{air} = 0.9$ à $\theta = 125$ deg) à la pression de sortie ($P_{cc}/P_{air} = 0.33$ à $\theta = 45$ deg) au cours de la phase d'échappement. Lorsque les cames d'admission s'ouvrent ($\theta = 55$ deg), la pression remonte à nouveau jusqu'à ce que la chambre soit remplie ($\theta = 125$ deg).

La Fig. 5.10 montre également que dans l'expérience, la pression décroît lentement entre 125 et 170 degrés, quand les valves sont fermées, ce qui indique que le dispositif expérimental présente de légères fuites. Dans le même intervalle de temps, la pression décroît également dans la simulation LES, ce qui confirme que la méthodologie MISCOC introduit des fuites

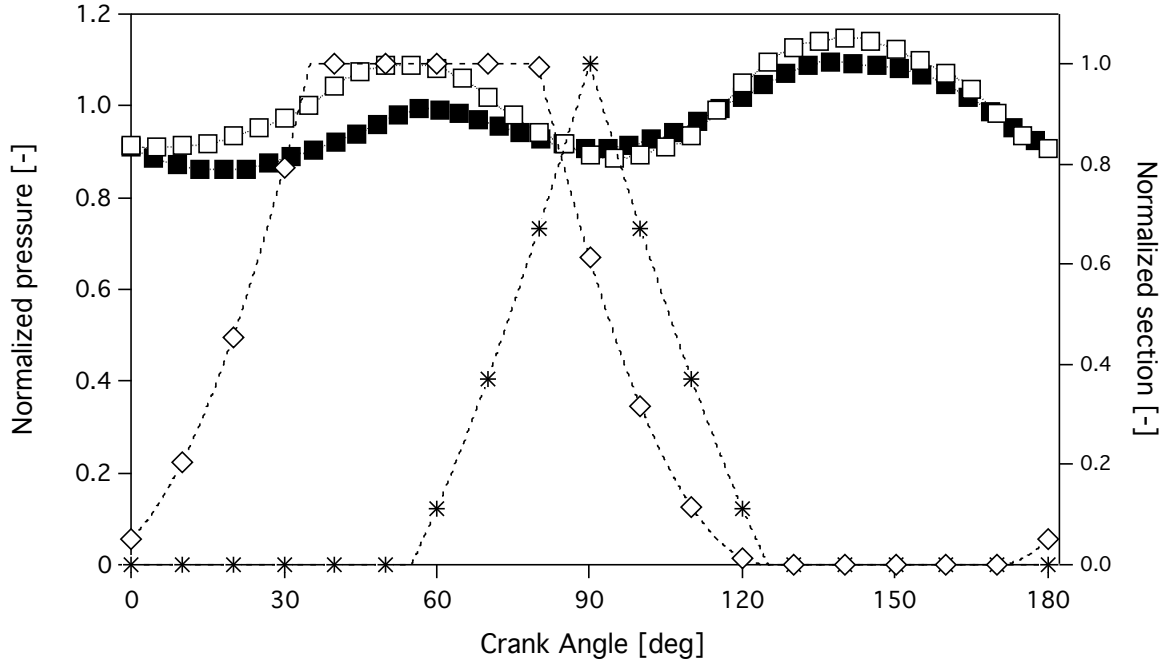


FIGURE 5.9 : OP1 : comparaison des cycles à froid obtenus expérimentalement et par la LES (Table 5.3) - Evolution temporelle de la pression dans la chambre de carburation sur 10 cycles consécutifs. (■) Pression LES dans la chambre de carburation P_{adm}/P_{air} . (□) Pression expérimentale dans la chambre de carburation. (*) Section d'admission. (◇) Section d'échappement.

numériques. Ces fuites, inhérentes à la méthode numérique, sont dues à la zone de recouvrement entre les deux maillages autour des valves, et peuvent être ajustées en changeant la taille de cette région comme discuté dans le Chap. 4. Ce n'est pas nécessaire dans ce cas puisqu'elles se trouvent être très comparables à celles de l'expérience.

Le maximum de pression normalisée P_{cc}/P_{air} (0.9) est correctement prédit par la LES. La pression dans la chambre de combustion ne dépasse donc pas 90 % de la pression amont P_{air} . Dix cycles ont été simulés, et seules de légères variations cycle à cycle peuvent être observées sur les courbes de pression. Ce résultat, qui n'est pas surprenant en conditions non-réactives, montre que l'efficacité volumétrique du système¹ n'est pas sensible à la variabilité cycle à cycle. Cette efficacité, mesurée à la fermeture des valves, est de 94% dans ces conditions opératoires.

Le débit massique moyen qui traverse effectivement la chambre est une grandeur intéressante, puisqu'il contrôle le rendement volumétrique. Il est reporté dans la Tab. 5.4 pour les points de fonctionnement non-réactif (OP1), et réactifs (OP2 et OP3). La LES permet de prédire le débit mesuré expérimentalement à 5% près. Ce bon accord avec les données expérimentales n'est pas trivial à assurer dans un code LES, puisque pour estimer correctement le débit, les pertes de charges doivent être précisément reproduites pour toutes les sections de passage.

1. L'efficacité volumétrique correspond à la masse d'air enfermée quand les valves sont fermées, normalisée par la valeur maximale atteignable si la pression dans la chambre P_{cc} était égale à la pression du réservoir amont P_{air} .

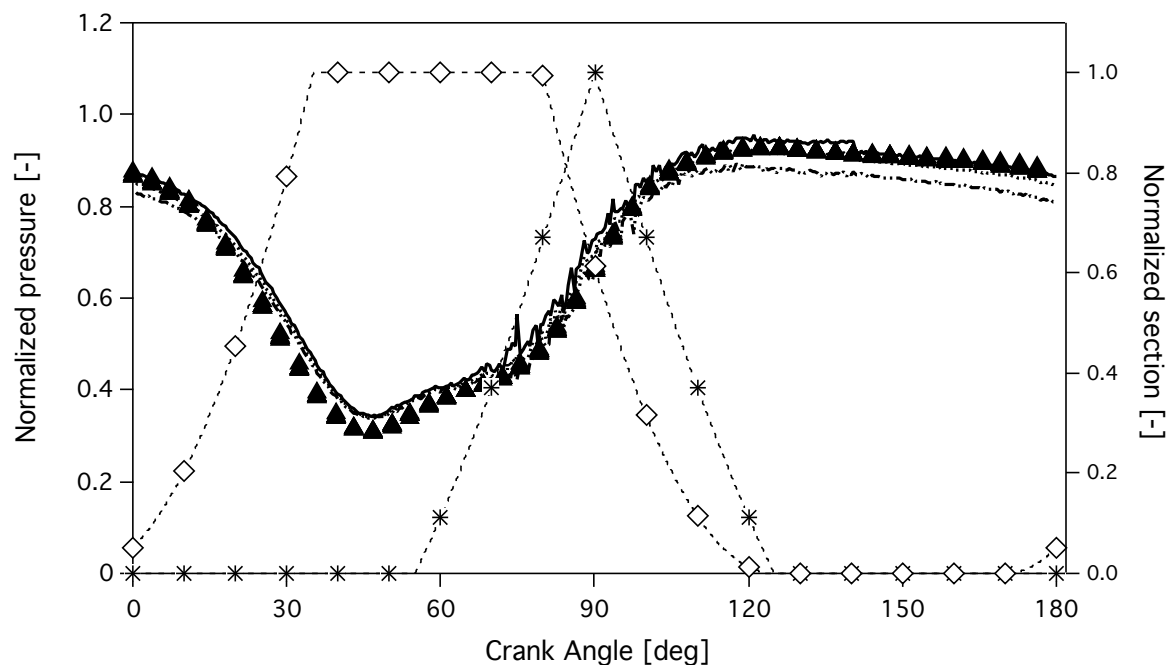


FIGURE 5.10 : OP1 : comparaison des cycles à froid obtenus expérimentalement et par la LES (Table 5.3) - Evolution temporelle de la pression dans la chambre de combustion sur 10 cycles consécutifs. (▲) Pression LES dans la chambre de combustion P_{cc}/P_{air} . (—) Pression expérimentale maximale dans la chambre de combustion. (---) Pression expérimentale minimale dans la chambre de combustion. (.....) Pression expérimentale moyenne dans la chambre de combustion. (*) Section d'admission. (◇) Section d'échappement.

TABLE 5.4 : Débit massique moyen pour chaque point de fonctionnement étudié. Le débit moyen LES a été obtenu en réalisant une moyenne sur 10 cycles consécutifs pour OP1, sur 20 cycles consécutifs pour les cas OP2 et OP3.

Point de fonctionnement [-]	Débit moyen expérimental [g/s]	Débit moyen LES [g/s]
OP1	104	102
OP2	85	90
OP3	100	95

5.2.1 Moyennes de phase

La Fig. 5.11 présente des moyennes de phase de la vitesse au cours d'un cycle (la Fig. 5.12 rappelle le phasage des cames). Les 6 instants présentés ici sont :

- $\theta=127$ deg : juste après l'angle auquel se fera l'allumage pour les cas réactifs (cames d'admission et d'échappement fermées),
- $\theta=168$ deg : pendant la phase où les cames sont toutes fermées (volume constant),
- $\theta=17$ deg : au début de l'échappement (ouverture des cames d'échappement),
- $\theta=46$ deg : juste avant l'ouverture des cames d'admission
- $\theta=82$ deg : pendant la phase d'admission (cames d'admission et d'échappement ouvertes),
- $\theta=110$ deg : en fin de phase d'admission.

Comme prévu, les vitesses sont maximales entre les cames d'échappement à l'angle $\theta = 17$ deg lorsque le col est encore amorcé. La pression diminue dans la chambre de combustion (Fig. 5.10) au cours de la vidange, ce qui réduit les vitesses au col d'échappement quand le col n'est plus sonique ($\theta = 46$ deg).

Les vitesses au niveau des cames d'admission sont maximales à l'angle $\theta = 82$ deg. Les isocontours de vitesse à $u = 0$ m/s révèlent des zones de recirculation derrière les cames d'admission pendant la phase d'admission ($\theta = 82$ deg).

A la fermeture des cames d'admission ($\theta = 127$ deg), des zones de recirculation se forment sur le haut et le bas de la chambre et des vitesses résiduelles de plus de 20 m/s sont notées.

Les faibles variations cycliques à froid font que ces champs de vitesse sont raisonnablement moyennés avec seulement 10 cycles sur la Fig. 5.11. Nous verrons que la situation est plus complexe pour les cas avec combustion.

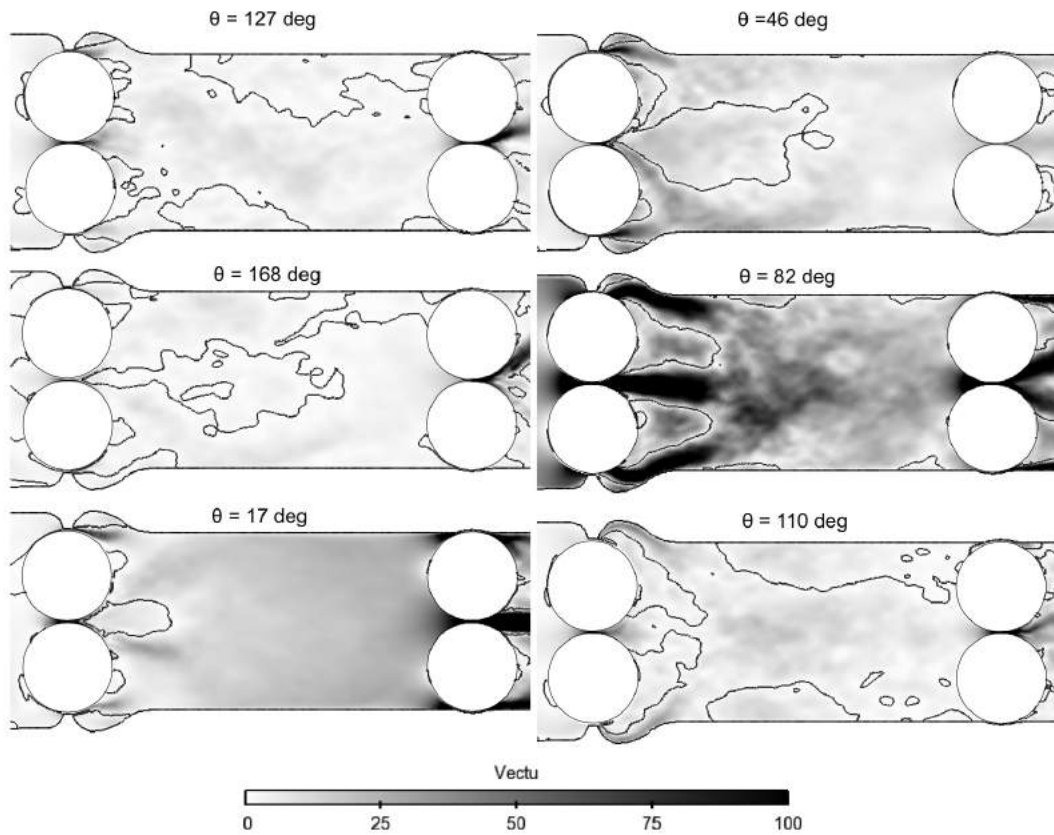


FIGURE 5.11 : Moyennes de phase des cycles non réactifs (OP1) : isocontour de vitesse axiale ($u = 0$ m/s) superposé au champ de $|u|$ (0 à 100 m/s) à 6 instants du cycle : $\theta=127\text{deg}$, $\theta=168\text{deg}$, $\theta=17\text{deg}$, $\theta=46\text{deg}$, $\theta=82\text{deg}$ et $\theta=110\text{deg}$.

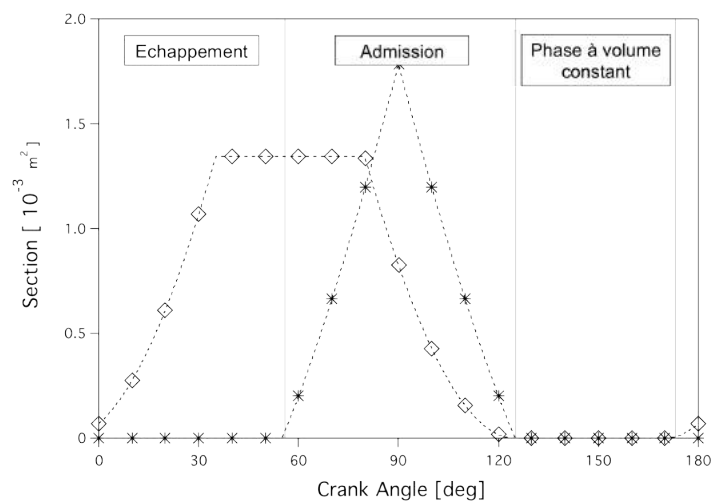


FIGURE 5.12 : Evolution des sections d'admission et d'échappement au cours d'un cycle CVC. (*) Section d'admission. (◇) Section d'échappement.

5.3 Détermination des paramètres du modèle 0D

5.3.1 Détermination du coefficient de décharge C_d

Le coefficient de décharge C_d des cames du thermoréacteur est un paramètre d'entrée du code CVC0D qui peut être déterminé par des mesures expérimentales (non disponibles ici) ou par des simulations. Ici, on a déterminé C_d à partir de simulations LES. Deux calculs sont réalisés afin d'obtenir la valeur du C_d pour chaque rideau de came : admission et échappement.

Le calcul mis en place est un calcul de type banc volute : la came est positionnée dans un écoulement en position pleine ouverte. La Fig. 5.13 représente le calcul mis en place avec la came d'échappement. Le même calcul est réalisé en remplaçant la came d'échappement par la came d'admission (Fig. 5.14). Les géométries réelles des cames (Figs. 2.10 et 2.11) sont calculées. Seule la longueur des cames selon la direction transverse est réduite à 30 mm (la longueur réelle des cames est de 57 mm) afin de gagner en temps de calcul (Fig. 5.15).

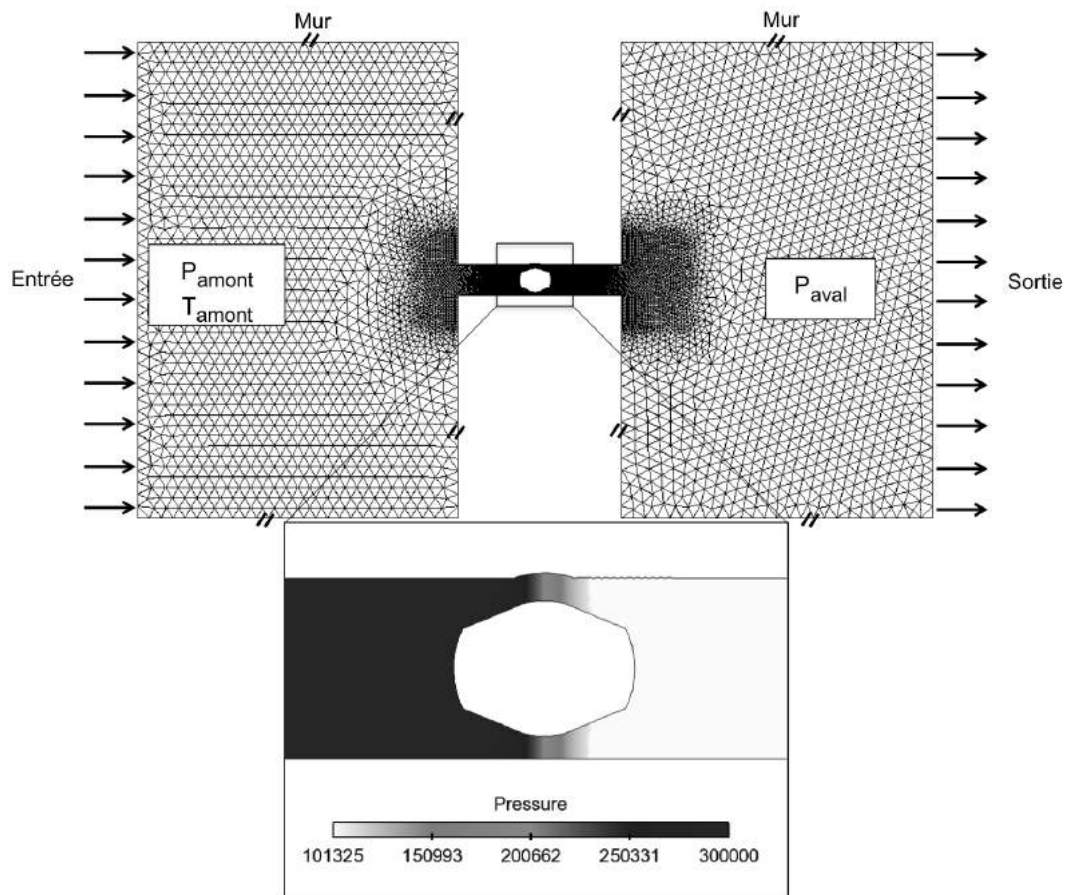


FIGURE 5.13 : Mise en place du calcul volute : détermination du coefficient de décharge à travers la came d'échappement. Vue du haut : géométrie avec conditions aux limites. Vue du bas : conditions initiales avec zoom sur la came d'échappement.

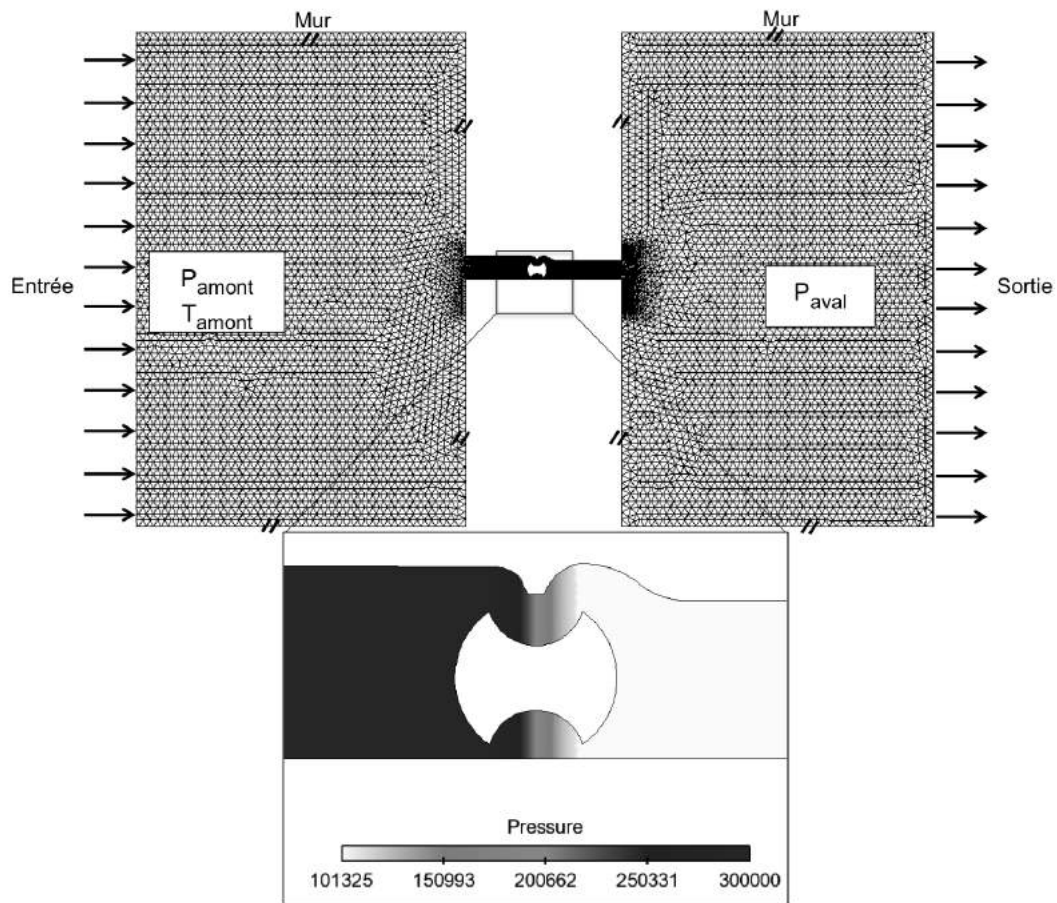


FIGURE 5.14 : Mise en place du calcul volute : détermination du coefficient de décharge à travers la came d'admission. Vue du haut : géométrie avec conditions aux limites. Vue du bas : conditions initiales avec zoom sur la came d'admission.

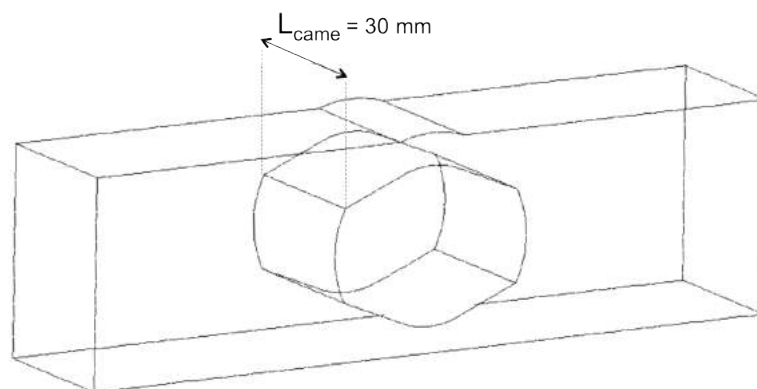


FIGURE 5.15 : Calcul volute pour une came d'échappement : vue 3D de la came d'échappement. La longueur de la came L_{came} est fixée à 30 mm.

Pour les deux cas, admission et échappement, le calcul est initialisé avec un différentiel de pression $P_{amont}-P_{aval}$ donné dans la Tab. 5.5, correspondant aux conditions des essais expérimentaux étudiés lors de l'ouverture de la soupape. Le champ initial de pression apparaît sur les Figs. 5.13 et 5.14.

TABLE 5.5 : Données d'entrée calcul Volute

Pression réservoir amont P_{amont} [bar]	Température réservoir amont T_{amont} [K]	Pression réservoir aval P_{aval} [bar]
3	400	1

Le coefficient de décharge C_d est ensuite déterminé à partir de la variation d'enthalpie ΔH entre l'amont et l'aval de la came. Pour ce cas amorcé, la formule 3.36 donne directement C_d :

$$C_d = \dot{m} \frac{\sqrt{rT_0}}{P_0 S \sqrt{\gamma}} \left(\frac{\gamma + 1}{2} \right)^{\frac{\gamma+1}{2(\gamma-1)}} \quad (5.1)$$

L'indice 0 correspond aux conditions amont de la came.

• Résultats obtenus pour la came d'échappement

La Fig. 5.16 présente la variation temporelle du débit massique obtenu pour le calcul volute de la came d'échappement. Le calcul converge en 15ms. Une fois convergé, il peut être utilisé pour déterminer C_d . Le débit moyen est de $\dot{m} = 0.11\text{kg/s}$ avec une déviation standard de 0.3 %.

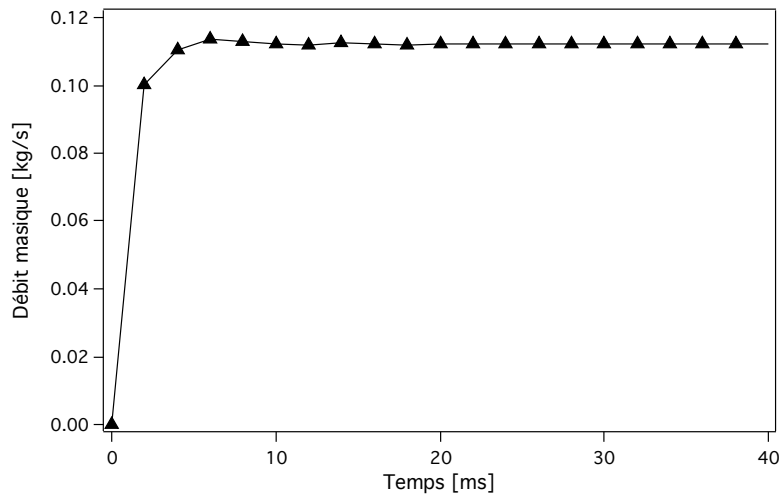


FIGURE 5.16 : Résultats du calcul volute de la came d'échappement : évolution temporelle du débit.

Les Figs. 5.17 et 5.18 montrent les champs de Mach et de pression moyens. Des chocs sont observés légèrement en aval de la section de passage minimum S utilisée dans l'Eq. 5.1. S apparaît sur la Fig. 5.17 : $S = S_1 + S_2$ avec S_1 et S_2 sections de passage de part et d'autre de la came.

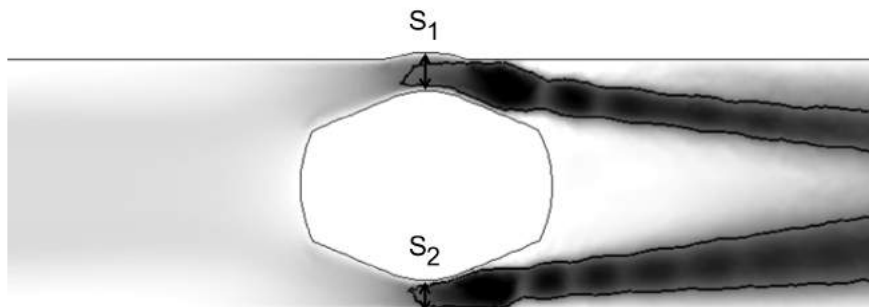


FIGURE 5.17 : Résultats du calcul volute pour la came d'échappement : champ moyen du nombre de Mach (0 à 2) avec isocontour à Mach = 1 et position de la section minimale S au col de la came $S = S_1 + S_2$.

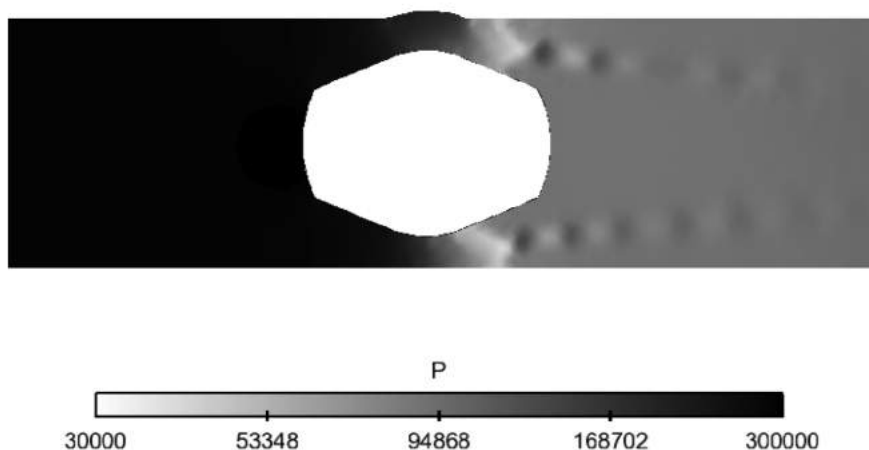


FIGURE 5.18 : Résultats du calcul volute pour la came d'échappement : champ moyen de pression (0.3 à 3 bars).

Avec un débit moyen de $\dot{m} = 0.11$ kg/s, une section minimale de $S = 3.7\text{cm}^2$ et $\gamma = 1.35$, on obtient un coefficient de décharge pour la came d'échappement de : $C'_{d,echap} = 0.55$.

• Résultats obtenus pour la came d'admission

Comme pour le calcul volute de la came d'échappement, on regarde l'évolution temporelle du débit massique, obtenu cette fois ci pour le calcul volute de la came d'admission. La Fig. 5.19 montre que le débit massique oscille faiblement autour d'une valeur moyenne de $\dot{m} = 0.099 \text{ kg/s}$ avec une déviation standard de 3%. On considèrera cette valeur moyenne pour le calcul du C_d .

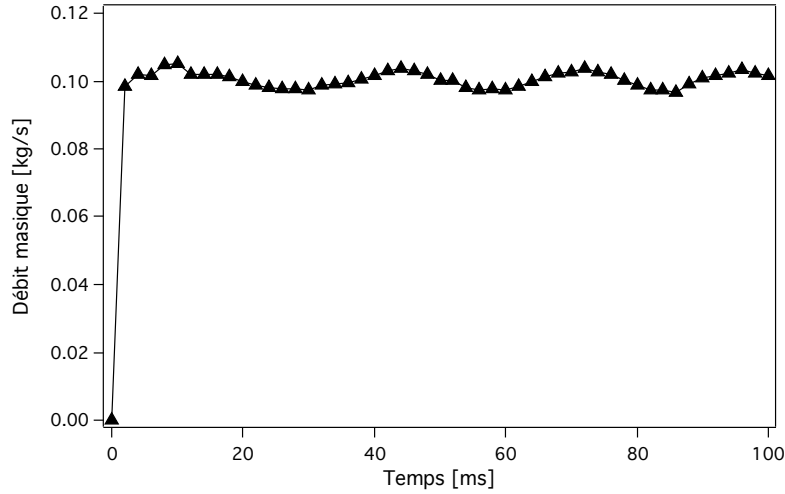


FIGURE 5.19 : Résultats du calcul volute de la came d'admission : évolution temporelle du débit.

Les champs moyens de Mach et de pression sont représentés sur les Fig. 5.20 et 5.21. La section minimale S apparaît sur la Fig. 5.20 et est égale à : $S = 4\text{cm}^2$. Les chocs sont plus complexes que pour l'échappement qui était à géométrie symétrique (Fig. 5.17). Pour l'admission, le système de choc n'est pas le même au centre de la veine et sur le côté. L'objectif de la thèse n'était pas d'analyser ces chocs mais il est clair que la forme des soupapes pourrait être optimisée à partir de ces LES. Ici, on s'est contenté de mesurer C_d .

A partir de l'Eq. 5.1, on obtient ainsi une valeur de C_d pour la came d'admission de : $C_{d,adm}=0.45$. La came d'admission a une géométrie moins aérodynamique (Fig. 2.10) que la came d'échappement (Fig. 2.11) et elle obstrue donc plus l'écoulement. Son coefficient de décharge est aussi plus élevé que celui de la came d'échappement.

On peut noter qu'un seul calcul LES (pour le débit maximum) a été effectué. L'expérience acquise au Cerfacs sur des calculs du même type (banc volute pour les moteurs à piston ou systèmes d'injection des turbines à gaz) montre qu'à géométries fixées, le coefficient C_d est quasiment constant (la loi $\Delta P \propto \dot{m}^2$ se vérifie très bien) et que donc un calcul unique suffit pour avoir C_d .

Un second problème est que dans le cas réel, la soupape tourne. Même si on admet qu'à chaque instant, la loi $\dot{m} = f(\Delta P)$ est vérifiée, la valeur de C_d pourrait changer avec la position de la valve. Il est donc clair qu'il faudrait répéter ce calcul pour toutes les positions de la came afin d'obtenir les variations de C_d avec la position de came. Ici nous nous sommes limités à prendre une valeur unique pour toutes les positions de came.

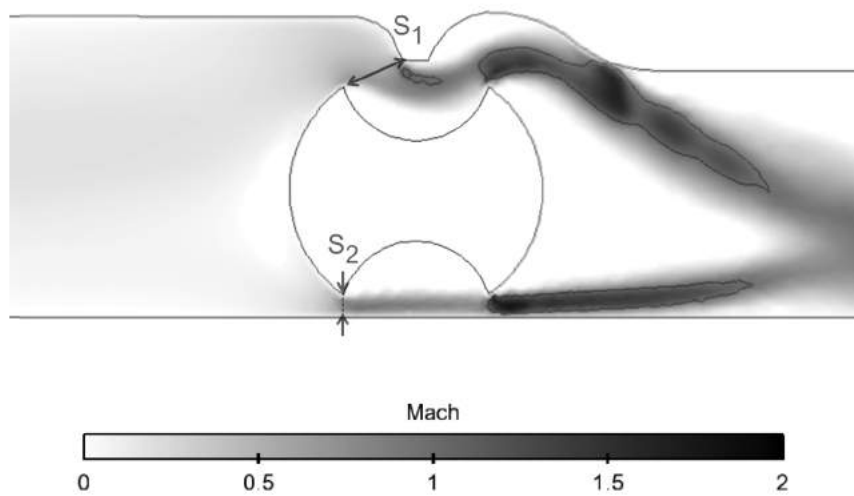


FIGURE 5.20 : Résultats du calcul volute pour la came d'admission : champ moyen du nombre de Mach (0 à 2) avec isocontour à $Mach = 1$ et position de la section minimale S au col de la came $S = S_1 + S_2$.

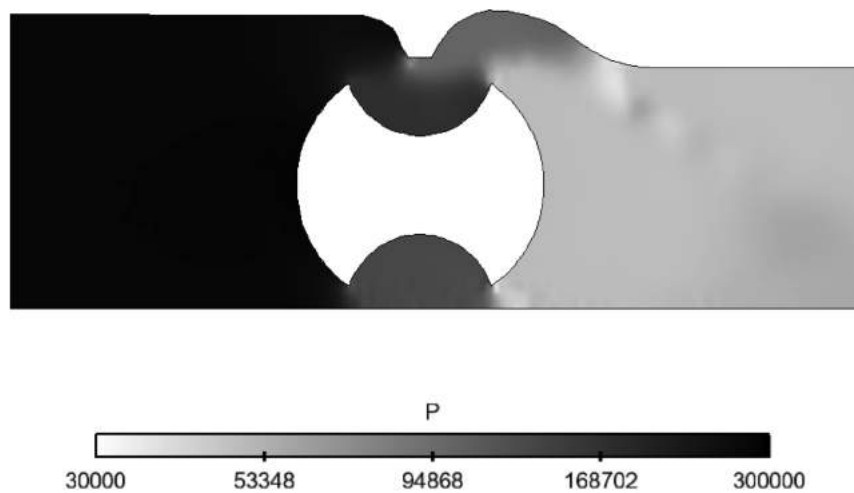


FIGURE 5.21 : Résultats du calcul volute pour la came d'admission : champ moyen de pression (0.3 à 3 bars).

Enfin pour des régimes de rotation élevés, la loi $\Delta P \propto \dot{m}^2$ pourrait être prise en défaut et nécessiter la prise en compte des effets d'histoire. Cet aspect a été totalement ignoré ici.

5.3.2 Détermination des temps et vitesses caractéristiques pendant la fermeture des soupapes

On cherche ici à déterminer les constantes du modèle identifiées dans la Sec. 3.8 : a , $C_{\varepsilon 2}$ et $\tau_{0,EBU}$. Ces constantes interviennent dans l'expression de la vitesse moyenne de l'écoulement U , durant la phase de combustion. U est aussi utilisée dans le calcul des pertes thermiques (Eq. 3.8). Pour rappel :

$$U = U_0 \left[1 + (C_{\varepsilon 2} - 1) \frac{t - t_0}{\tau_{0,EBU}} \right]^{\frac{-1}{2(C_{\varepsilon 2} - 1)}} \quad (5.2)$$

$$\text{avec} \quad U_0 = a U_{in}^{max} \quad (5.3)$$

où t_0 est l'instant où les deux soupapes se ferment ($\theta = 125$ deg). La LES nous permet de fixer ces constantes afin d'approximer le comportement du fluide dans la chambre durant la phase de combustion.

La moyenne de la norme de la vitesse dans la chambre de combustion est tracée en fonction de l'angle du cycle sur la Fig. 6.15. Elle est maximum pendant l'admission ($\theta = 75$ deg). Quand les cames sont toutes les deux fermées, elle décroît. La Fig. 5.23 trace la norme de la vitesse moyenne pendant la phase de combustion, entre 125 et 175 deg, et confirme que cette vitesse baisse. Cette décroissance est donc ici approximée par l'expression de la diminution de la turbulence dans une boîte où on aurait une turbulence homogène isotrope à 125 deg (Eq. 5.4).

La détermination de U (Eq. 5.4) est tracée sur la Fig. 5.23. En prenant une valeur classique pour $C_{\varepsilon 2}$ ($C_{\varepsilon 2} = 1.92$), on voit qu'avec $\tau_{0,EBU} = 2$ ms, le modèle de l'Eq. 5.4 prédit très bien la variation de U dans le temps. Ce temps caractéristique ne dépend pas de la vitesse de rotation car cette décroissance se fait dans un volume fermé (cames fermées) et on peut donc utiliser $\tau_{0,EBU}$ pour tous les cas tant que la forme de la chambre ne change pas.

A partir des Eq. 3.48 et 3.47, on remonte à la valeur de a :

$$a = \frac{U_0}{U_{in}^{max}} = \frac{L_c}{\tau_{0,EBU} U_{in}^{max}} \quad (5.4)$$

Le col des cames étant sonique durant la phase d'admission (rapport de pression supérieur au rapport critique), la vitesse maximale U_{in}^{max} est environ égale à 350 m/s. La longueur caractéristique correspond à la demi hauteur de chambre. La constante a est alors égale à 0.05 : le modèle employé dans CVC0D supposera donc que la vitesse moyenne initiale dans la chambre U_0 est donc égale à 5% de la vitesse maximale atteinte au col des cames d'admission.

Les constantes entrées dans CVC0D sont finalement :

$$\begin{aligned} C_{\varepsilon 2} &= 1.92 \\ a &= 0.05 \end{aligned}$$

(5.5)

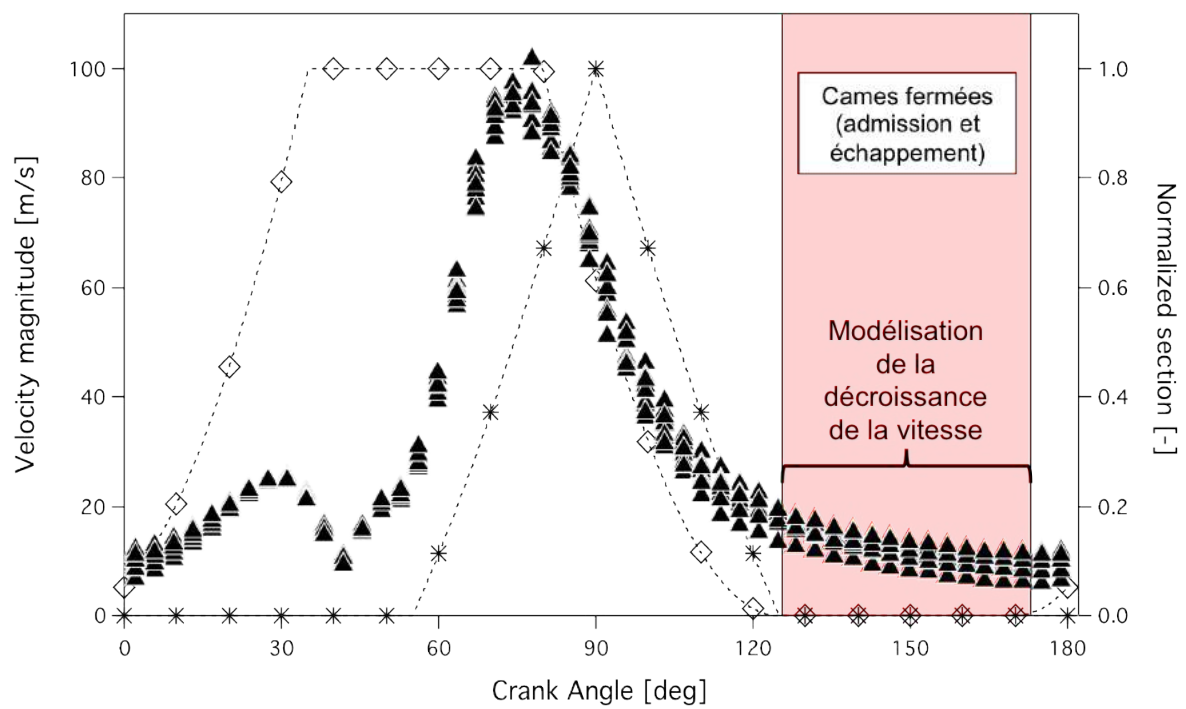


FIGURE 5.22 : OPI : Norme de la vitesse moyenne en fonction de l'angle du cycle pour un calcul non réactif. (▲) LES : norme de la vitesse moyenne sur toute la chambre de combustion pour 10 cycles consécutifs. (*) Section d'admission. (◇) Section d'échappement.

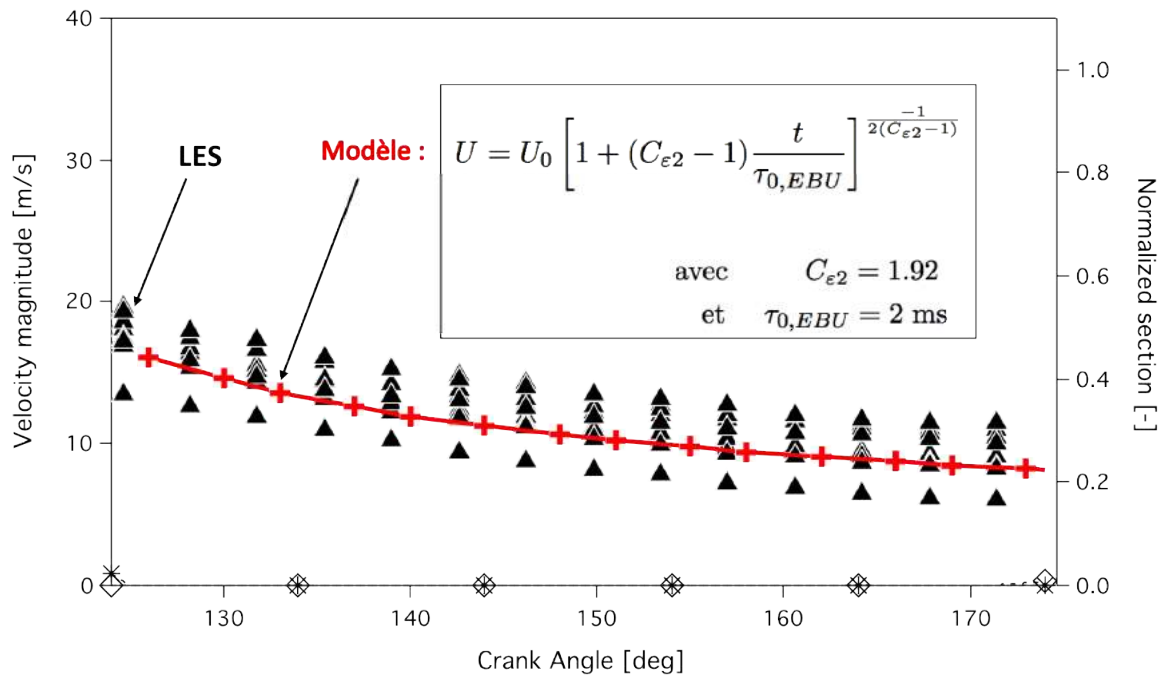


FIGURE 5.23 : OP1 : Norme de la vitesse moyenne en fonction de l'angle du cycle sur la phase de combustion (entre 125 deg et 175 deg). (+) Modélisation EBU de la vitesse U . (▲) LES : Norme de la vitesse moyenne sur toute la chambre de combustion pour 10 cycles consécutifs sans combustion. (*) Section d'admission. (◇) Section d'échappement.

5.4 Comparaison CVC0D avec résultats expérimentaux et LES sur un cas non réactif : OP1

On analyse ici les résultats que donne le modèle 0D sur le point de fonctionnement OP1 donc sans combustion. Ces résultats sont comparés aux données expérimentales, ainsi qu'aux résultats de la LES.

Au niveau de la mise en données, le calcul 0D est initialisé comme défini dans la Tab. 5.3. Les coefficients de décharge déterminés par la LES (Sec. 5.3.1) sont intégrés au modèle 0D dans le calcul des débits massiques d'entrée et de sortie : $C_{d,adm} = 0.45$ pour la came d'admission et $C_{d,echap} = 0.55$ pour la came d'échappement.

• Evolution de la pression dans la chambre

On constate sur la Fig. 5.24 que la pression prédite par CVC0D (les +) suit bien les cycles expérimentaux pour ces cas non réactifs. La fuite au niveau des comes, constatée sur les données expérimentales, a également été prise en compte dans la modélisation 0D. Pour la déterminer, on suppose tout d'abord que seules les comes d'échappement présentent une fuite, et que le débit de fuite est constant quand les comes sont fermées. On calcule ensuite la section de fuite à partir de la chute de pression obtenue expérimentalement (0.3 bar) et des caractéristiques thermodynamiques des gaz au col des comes. Les résultats montrent que la section de fuite est évaluée à 2% de la section maximale d'échappement.

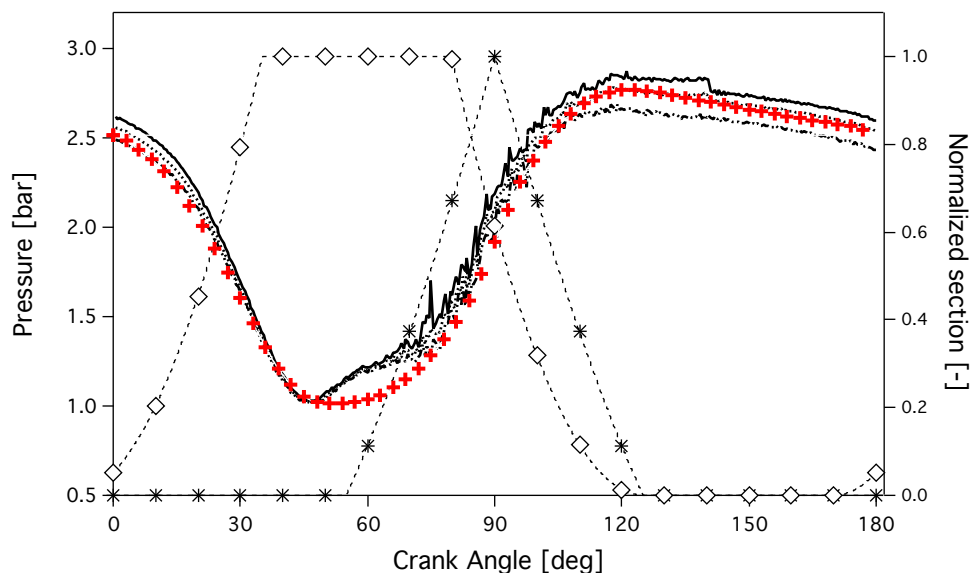


FIGURE 5.24 : OP1 : comparaison des cycles à froid obtenus expérimentalement et avec l'outil CVC0D - Evolution temporelle de la pression dans la chambre de combustion sur 10 cycles consécutifs. (—) Pression expérimentale maximale. (- - -) Pression expérimentale minimale. (.....) Pression expérimentale moyenne. + Pression CVC0D (*) Section d'admission. (◇) Section d'échappement.

• **Comparaison des débits massiques d'admission et d'échappement obtenus par la LES et avec CVC0D**

CVC0D utilise les formules 3.36 et 3.37 pour calculer les débits. Le calcul LES, lui, résout à chaque instant l'écoulement et calcule aussi les débits d'entrée et de sortie en y incorporant tous les effets (C_d variable, effets d'histoire). Il est donc intéressant de comparer les débits obtenus par CVC0D et AVBP. Rappelons que pour CVC0D, on suppose les C_d constants (voir Sec. 5.3.1).

Les Figs. 5.25 et 5.26 montrent respectivement les évolutions des débits massiques d'entrée et de sortie au cours d'un cycle. Les résultats obtenus par la LES ($\blacktriangle$) et avec CVC0D ($+$ ou $\times$) sont présentés. Les sections géométriques ($*$ ou $\diamond$) sont aussi ajoutées pour visualiser la position des cames.

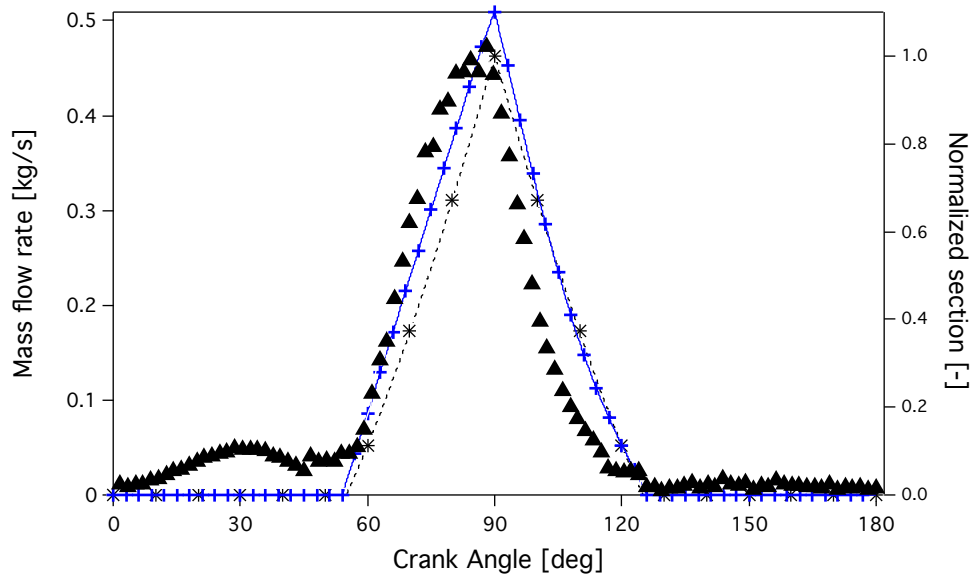


FIGURE 5.25 : OPI : comparaison des résultats CVC0D et de la LES. Evolution du débit massique à l'admission au cours du cycle. ($+$) CVC0D. ($\blacktriangle$) LES. ($*$) Section d'admission.

On constate que le débit d'admission est assez bien prédit par CVC0D (Fig. 5.25) même si les effets transitoires se manifestent : à chaque angle, le débit CVC0D ($+$) suit presque la variation de section de passage ($*$) alors que le débit LES ($\blacktriangle$) est déphasé par rapport à la section de passage. Ceci est dû au temps nécessaire pour établir l'écoulement, un mécanisme ignoré dans CVC0D.

Au niveau échappement, le débit suit une variation plus complexe : entre 0 et 45 deg (Branche 1), les soupapes d'échappement s'ouvrent et la chambre se vide. Le débit tombe à zéro vers 50 deg car la pression chambre à cet instant est proche de 1 bar, donc de la pression extérieure (Fig. 5.24). A ce moment, les soupapes d'admission s'ouvrent et la pression remonte (Branche 2). Mais l'échappement n'est pas encore fermé, il ne fermera qu'à 120 deg. Ainsi, le débit d'échappement remonte et présente un second pic à 80 deg. La LES comme CVC0D capte

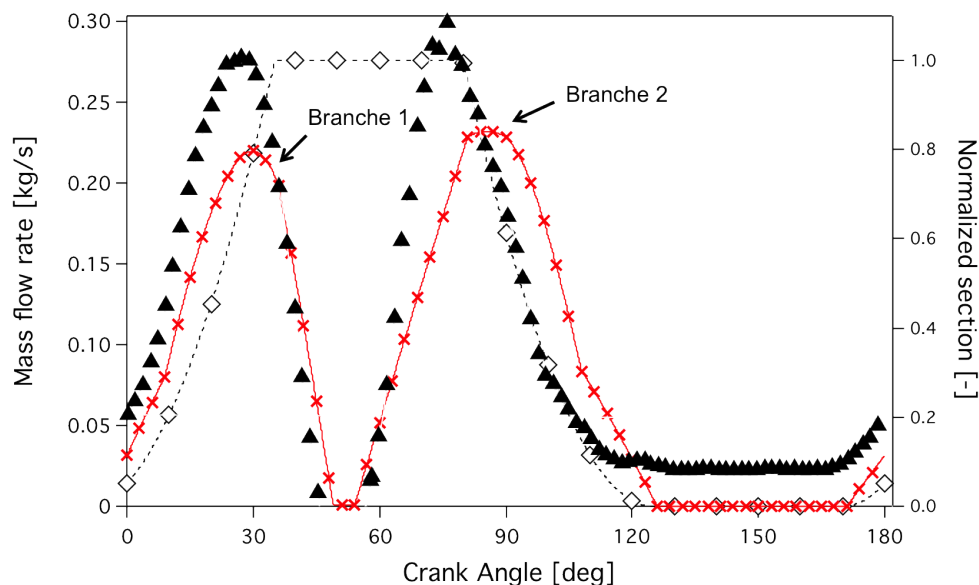


FIGURE 5.26 : *OPI* : comparaison des résultats CVC0D et de la LES. Evolution du débit massique à l'échappement au cours du cycle. (×) CVC0D. (▲) LES. (◇) Section d'échappement.

ces 2 maxima mais CVC0D sous-estime les débits maximums et les prédit avec un retard de presque 10 deg.

Pour analyser l'écart entre CVC0D et la LES, on peut tracer les courbes $\dot{m} = f(\Delta P)$ pour l'admission (Fig. 5.27) et l'échappement (Fig. 5.28). L'admission présente une seule branche (un seul pic sur la Fig. 5.25) et l'échappement deux (deux pics sur la Fig. 5.26).

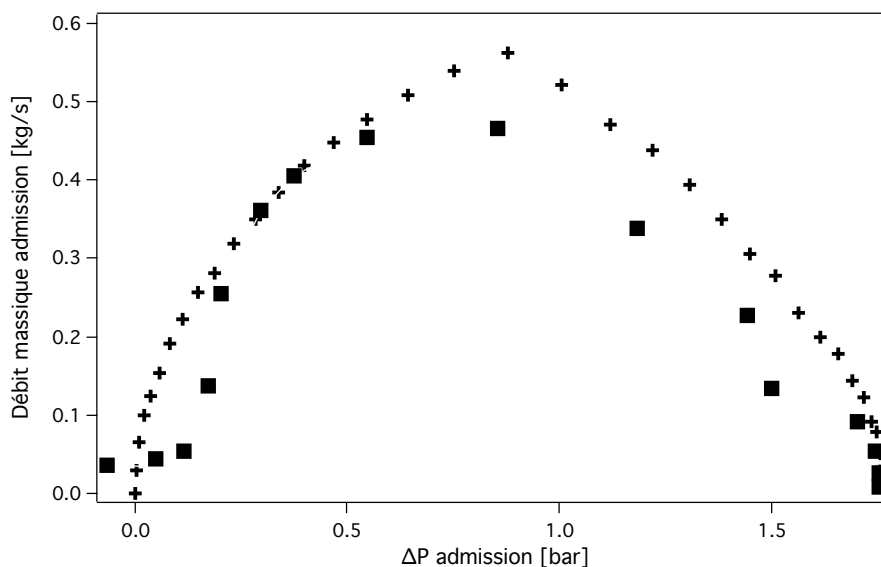


FIGURE 5.27 : Débit massique au col d'admission en fonction de la différence de pression entre l'amont et l'aval de la came. (■) LES. (+) CVC0D.

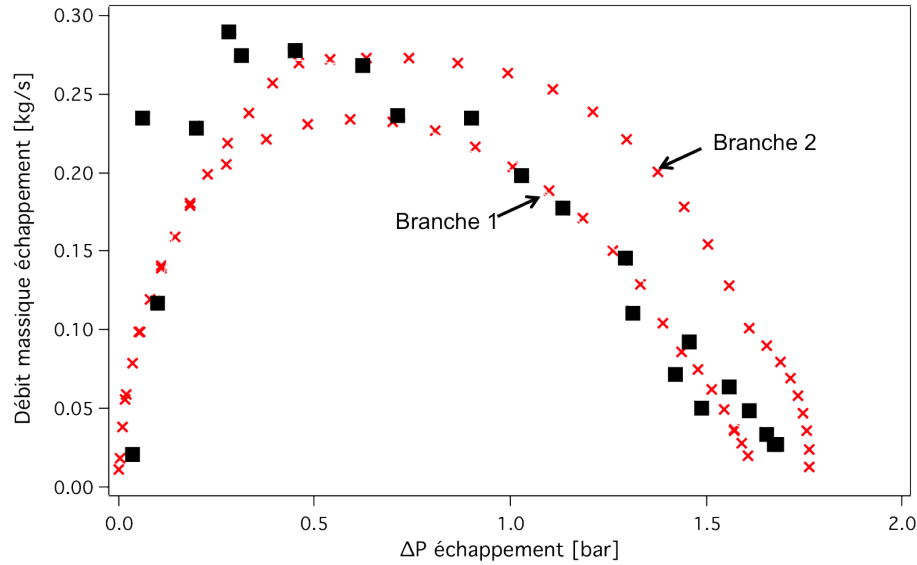


FIGURE 5.28 : Débit massique au col d'échappement en fonction de la différence de pression entre l'amont et l'aval de la came. (■) LES. (×) CVC0D.

On observe que CVC0D et la LES sont assez proches. La Fig. 5.28 montre un mécanisme intéressant : les débits LES ne sont pas les mêmes pour le même ΔP suivant que l'on est sur la première branche (angle < 45 deg) ou sur la seconde (angle > 60 deg). Ceci montre bien l'importance des transitoires : une loi simple $\dot{m} = f(\Delta P)$ comme celle employée dans CVC0D trouve ici ses limites.

• Comparaison des coefficients de décharge obtenus par la LES aux valeurs de C_d dans CVC0D

Il est aussi possible d'extraire les valeurs de C_d instantanés de la LES et de les comparer avec celles des C_d obtenus en Sec. 5.3.1 pour des soupapes fixées.

La Fig. 5.29 montre que la valeur de C_d à l'admission ($C_d = 0.45$) est en fait une valeur moyenne dépassée quand l'angle est inférieur à 90 deg et trop grande ensuite.

Pour l'échappement (Fig. 5.30), la valeur de C_d prise dans CVC0D ($C_d = 0.55$) est bien dans la gamme des C_d mesurés dans la LES mais ceux ci varient beaucoup (de 0.15 à 1.2). Ceci est clairement dû aux effets transitoires et on voit mal comment ces effets peuvent être inclus dans un code 0D.

En conclusion, même si les débits instantanés dans la LES exhibent des effets instationnaires forts, CVC0D capture correctement les débits moyens et permet de reproduire la pression chambre raisonnablement.

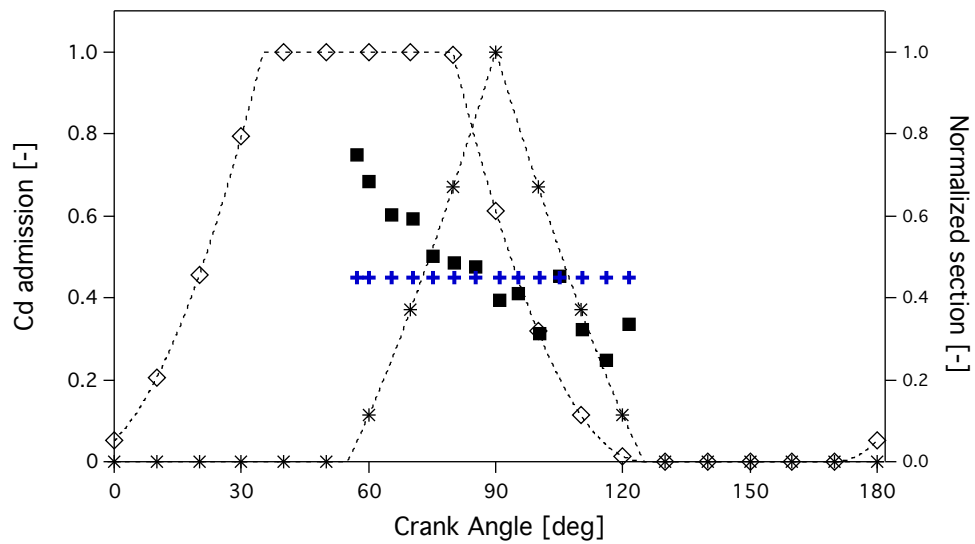


FIGURE 5.29 : Evolution du coefficient de décharge au cours du cycle au col d'admission. (■) LES. (+) CVC0D.

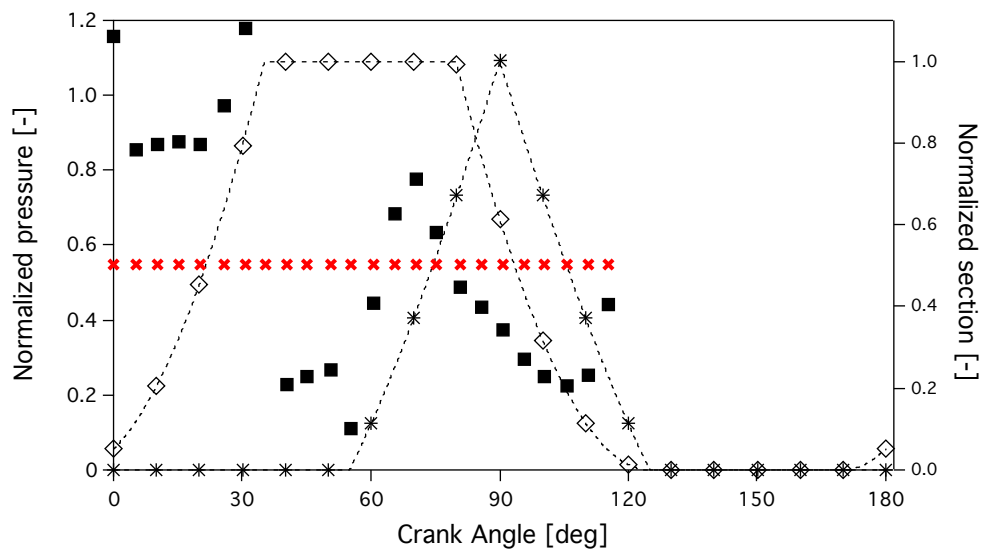


FIGURE 5.30 : Evolution du coefficient de décharge au cours du cycle au col d'échappement. (■) LES. (×) CVC0D.

• Evolution du nombre de Mach aux cols d'admission et d'échappement de la chambre

Une des sorties de CVC0D est le nombre de Mach au niveau des sections d'entrée et de sortie. Les Figs. 5.31 et 5.32 montrent respectivement l'évolution des nombres de Mach, obtenu avec CVC0D, au col d'admission et au col d'échappement au cours du cycle.

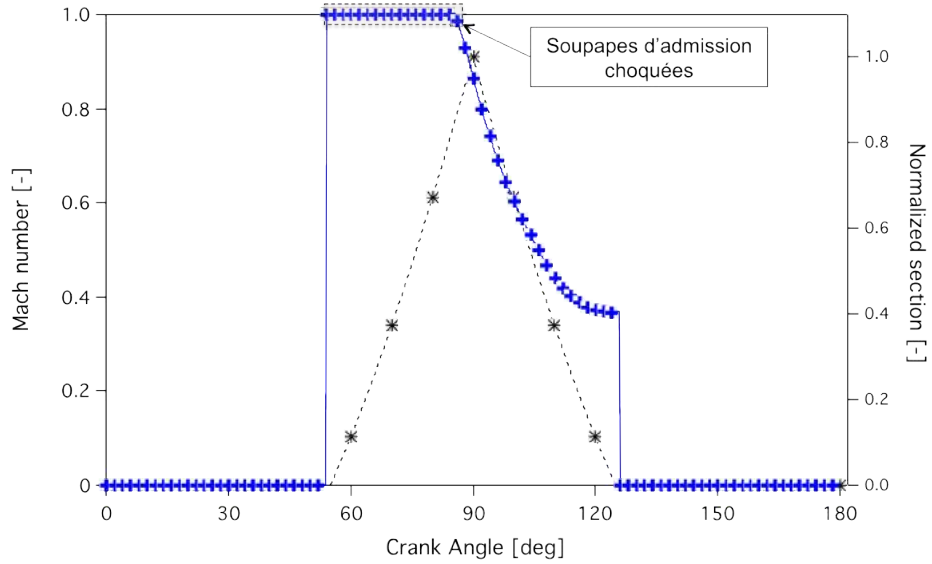


FIGURE 5.31 : OP1 : résultats CVC0D. évolution du nombre de Mach à l'admission au cours du cycle. (+) Mach à l'admission. (*) Section d'admission.

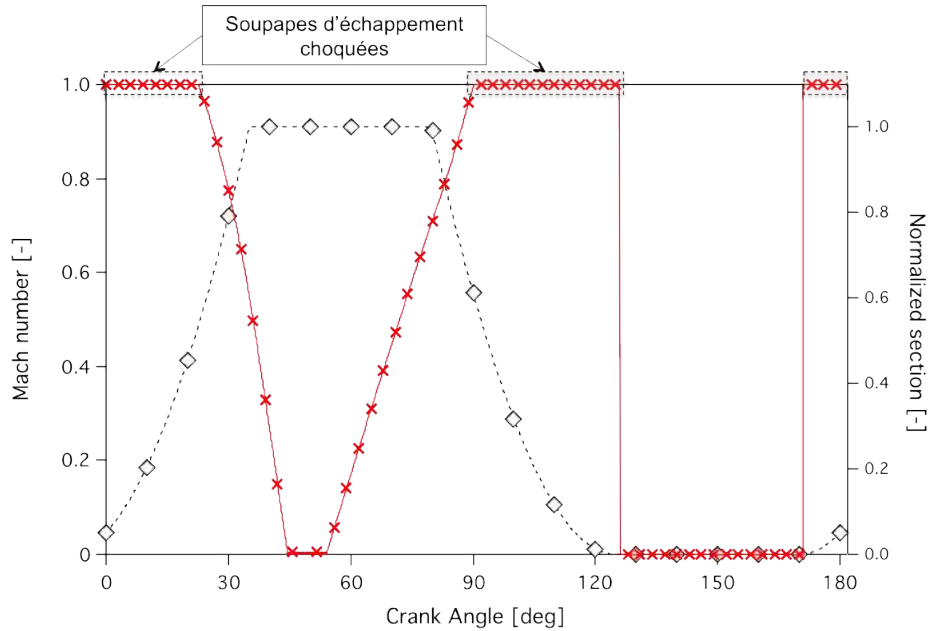


FIGURE 5.32 : OP1 : résultats CVC0D. évolution du nombre de Mach à l'échappement au cours du cycle. (x) Mach à l'échappement. (◇) Section d'échappement.

On voit ainsi que le col d'échappement reste amorcé de $\theta = 175^\circ$ (ouverture des soupapes d'échappement) à $\theta = 25^\circ$. Au delà, le rapport des pressions amont et aval diminue en dessous du rapport critique (Eq. 3.34), le col n'est donc plus sonique. Au niveau de l'admission, le col est amorcé entre $\theta = 55^\circ$ (ouverture des soupapes d'admission) et $\theta = 85^\circ$.

Au final, les soupapes du thermoréacteur sont donc choquées environ la moitié du temps de leurs ouvertures. Optimiser les formes de soupape pour ces phases soniques devra donc être une action future.

Chapitre 6

Calculs LES 3D réactifs

Sommaire

6.1	Modélisation de la combustion turbulente en LES	104
6.1.1	<i>Les régimes de combustion turbulente</i>	104
6.1.2	<i>Les modèles de combustion en LES</i>	107
6.1.3	<i>Le modèle de flamme épaissie TF</i>	107
6.1.4	<i>Le modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente TFLES</i>	109
6.1.5	<i>La fonction d'efficacité de Colin</i>	111
6.1.6	<i>Le modèle de flamme épaissie dynamique DTFLES</i>	113
6.2	Cinétique chimique	114
6.3	Modélisation de l'allumage : l'allumage ED	116
6.4	Résultats calculs à chaud : variabilité cycle à cycle	118
6.4.1	<i>Analysis of reacting CVC point OP2 (1200 rpm)</i>	118
6.4.2	<i>Carburation</i>	131
6.4.3	<i>Moyennes de phase</i>	133
6.4.4	<i>Analysis of reacting CVC point OP3 (1500 rpm)</i>	138
6.5	Comparaison CVC0D avec résultats expérimentaux et LES sur un cas réactif : OP2	142

Ce chapitre aborde l'analyse de la combustion dans la chambre CVC (thermoréacteur) de Poitiers en utilisant les résultats expérimentaux (mis à disposition par le laboratoire Pprime) et les résultats d'une LES de cycles réactifs successifs qui constitue à notre connaissance, le premier calcul LES réalisé dans une configuration de ce type.

La Sec. 6.1 présente les modèles de combustion LES employés pour ces calculs et en particulier le modèle TFLES (thickened flame) [22, 91, 92, 93, 94, 95] qui est employé ici dans sa forme standard..

De même le schéma cinétique à deux étapes pour la combustion isooctane / air sera décrit dans la Sec. 6.2. Le modèle d'allumage est un élément critique de la LES puisqu'on allume à chaque cycle et que l'on s'attend aussi à voir des ratés d'allumage. Le modèle employé ici est celui développé par Lacaze et Enaux [33, 22] où la bougie est remplacée par un dépôt d'énergie gaussien en espace et en temps. Ce modèle est discuté dans la Sec. 6.3.

Enfin, les résultats multicycles avec combustion sont présentés dans la Sec. 6.4 en utilisant à la fois les résultats LES et les résultats expérimentaux fournis par Pprime. Le premier résultat de cette étude est l'existence et l'analyse des variations cycliques qui dominent le cas réactif dans le thermoréacteur. La combustion est instable dans plusieurs cas d'opération et les expérimentations comme les LES montrent que ces instabilités sont assez fréquentes.

La LES est utilisée pour un cas modérément instable à 1200 tours/minute puis pour un cas plus instable à 1500 tours/minute où le nombre de cycles ne brûlant pas est plus élevé. La confrontation de la LES et des expériences permet de comprendre ces instabilités et de montrer en particulier que les cycles sont liés : c'est l'efficacité de la combustion dans le cycle N qui détermine l'écoulement et la combustion dans le cycle N+1. C'est souvent un mouvement de bascule qui est observé : un cycle qui brûle fortement est souvent suivi d'un cycle qui brûle mal. Un mécanisme critique semble être l'extinction des noyaux de flamme qui sont initiés dans un cycle où la vitesse des gaz au niveau de la bougie est trop élevée. Dans la chambre CVC, cette vitesse critique est de l'ordre de 30m/s dans le cas précis de la bougie et du carburant étudiés ici. Cette analyse rejoint des résultats classiques sur l'allumage dans un écoulement turbulent [45, 96, 97] qui montrent que l'allumage dans ces conditions devient un problème critique.

6.1 Modélisation de la combustion turbulente en LES

Les principes de la LES sans combustion ont été présentés au Chap. 4. On décrit ici l'extension au cas réactif et donc les modèles LES de combustion turbulente.

6.1.1 Les régimes de combustion turbulente

La turbulence agit fortement sur les structures des flammes prémélangées mais toutes les structures turbulentes n'agissent pas sur la flamme avec la même intensité. Plus les fluctuations de vitesse des petits tourbillons sont grandes, plus le front de flamme va interagir avec les petites échelles de la turbulence qui plissent le front de flamme et peuvent entraîner, dans des conditions

critiques, l'extinction de la flamme.

L'influence de ces petits tourbillons sur la flamme est caractérisée par le nombre de Karlovitz, noté Ka . Il compare un temps chimique caractéristique de la combustion $\tau_c = \delta_L/S_L$, où δ_L et S_L sont respectivement l'épaisseur et la vitesse de flamme laminaire, à un temps caractéristique de la turbulence à l'échelle de Kolmogorov $\tau_K = l_K/u_K$

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_K} = \frac{\delta_L}{S_L} \frac{u_K}{l_K} \quad (6.1)$$

- Si le nombre de Karlovitz est inférieur à 1, la turbulence n'a pas d'influence sur la structure interne de la flamme : c'est le **régime de flammelette** ou de flamme plissée (Fig. 6.1). La structure interne d'une flammelette correspond ainsi à celle de la flamme laminaire correspondante. Comme pour les flammes laminaires, la vitesse de flamme d'une flammelette est définie par la vitesse de consommation du carburant au travers de la flamme. Cependant, le plissement du front de flamme entraîne une augmentation de la surface effective de la flamme. Ainsi, le taux de consommation des réactifs augmente et la vitesse de propagation du front de flamme grandit.
- Si le nombre de Karlovitz est compris entre 1 et 100, les tourbillons de petite taille (de taille l_K) sont plus petits que l'épaisseur de flamme δ_L et peuvent influencer la zone de pré-chauffage, augmentant alors les transferts massiques et thermiques. Le front de flamme est alors épaissi par ces structures. C'est le **régime de flamme plissée-épaissi** (Fig. 6.2). La zone de réaction, plus petite que l'échelle de Kolmogorov, n'est pas influencée et conserve sa structure laminaire. Pour ce type de flamme, le nombre de Damköhler (Eq. 6.2) qui compare le temps de l'échelle intégrale de la turbulence $\tau_t = l_t/u'(l_t)$ avec le temps chimique τ_C , est proche de un.

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t}{u'(l_t)} \frac{S_L}{\delta_L} \quad (6.2)$$

- Pour des nombres de Karlovitz supérieur à 100 et des nombres de Damköhler très inférieurs à un, l'échelle de Kolmogorov l_K est plus petite que l'épaisseur de la zone de réaction δ_r . Toutes les échelles turbulentes influencent la flamme, dont la structure devient très différente de celle d'une flamme laminaire. C'est le **régime de flamme épaissi** (Fig. 6.3).

La Fig. 6.4 présente une illustration de ces différents régimes de combustion en se basant sur les observations précédentes. Ce diagramme initialement proposé par Peters [98] présente le rapport des vitesses $u'(l_t)/S_L$ en fonction du rapport des longueurs l_t/δ_L . Ce diagramme représente également la limite de régime entre les flammes laminaires et turbulentes à l'aide du nombre de Reynolds turbulent.

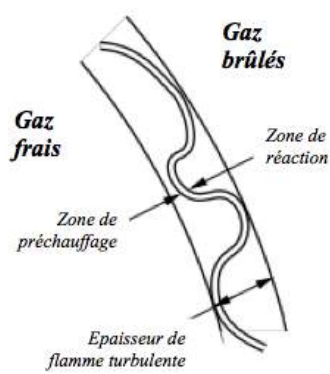


FIGURE 6.1 : $Ka < 1$: Régime de flammelette

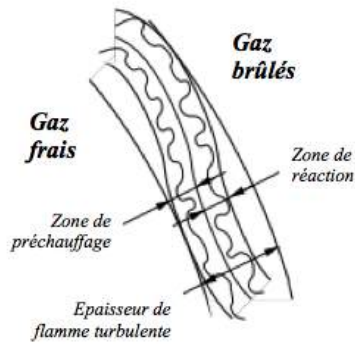


FIGURE 6.2 : $1 < Ka < 100$: Régime de flamme plissée épaissie

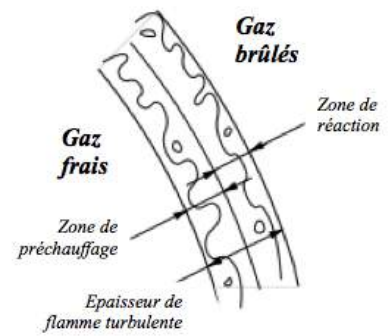


FIGURE 6.3 : $Ka > 100$: Régime de flamme épaissie

$$Re_T = Da^2 Ka^2 \quad (6.3)$$

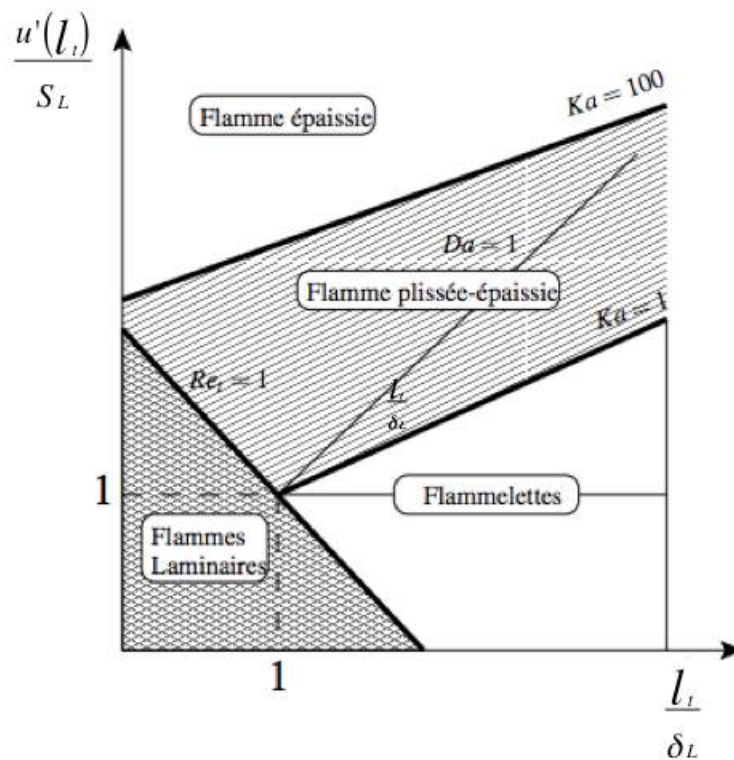


FIGURE 6.4 : Diagramme de classification des différents régimes de flammes turbulentes prémélangées [98, 99]

En combustion prémélangée, le front de flamme est de l'ordre de 0.1mm. Il est trop mince

pour être explicitement résolu dans des simulations numériques. Le coût de calcul pour des configurations industrielles comme le thermoréacteur serait beaucoup trop élevé. Un des objectifs de la simulation LES est de reproduire la plupart des interactions entre le front de flamme et la turbulence à l'aide de modèles. La Sec. 6.1.2 résume brièvement les différentes approches de la modélisation de la combustion en LES. Les sections suivantes décrivent ensuite les modèles basés sur la méthode de flamme épaissie utilisée dans le cadre de cette thèse.

6.1.2 Les modèles de combustion en LES

Trois approches distinctes ont été développées pour modéliser les flammes de prémélange en LES :

- les approches statistiques : basé sur les fonctions de densité de probabilité (**PDF**), ce type d'approche permet d'exprimer des taux de réaction moyens à partir de propriétés statiques de variables thermodynamiques (comme la fraction massique des espèces, la température) ainsi que des taux de réaction instantanés donnés par une loi d'Arrhénius. Cette approche a été principalement développée pour la combustion non prémélangée.
- les approches basées sur le **mélange turbulent** : pour des nombres de Damkhöler élevés, où les temps chimiques sont plus courts que les temps turbulents, les taux de réaction sont contrôlés par le taux de mélange turbulent. La modélisation de ces taux de mélange turbulent est généralement exprimée en terme de taux de dissipation scalaire. Les modèles de type Eddy BreakUp proposé par Spalding [59, 60] ou Bray, Moss et Libby [100] sont basés de cette analyse.
- les approches géométriques : la flamme est ici traitée comme une surface géométrique se propageant dans un écoulement turbulent, en considérant généralement une structure de flammelette. Pour déterminer la position du front de flamme, différentes techniques existent. La flamme peut être tout d'abord suivie (**G-equation**) ce qui implique la résolution d'une équation de transport pour l'interface de flamme pour déterminer sa position [98, 24]. Ensuite, la surface de flamme peut être filtrée (**FSD Flame Surface Density**), une isosurface de masse de température ou de fraction massique permet de déterminer la position de la flamme [101, 102, 35]. Enfin le modèle de flamme épaissie (**TF Thickened Flame**) épaissit artificiellement le front de flamme pour permettre sa résolution explicite [22, 91, 94, 95].

6.1.3 Le modèle de flamme épaissie TF

Le méthode de flamme épaissie est la méthode standard employée au Cerfacs. Elle permet d'augmenter l'épaisseur de la flamme afin de pouvoir la résoudre sur des maillages de type LES, en s'assurant que la vitesse de flamme épaissie est égale à la vitesse de flamme DNS. Butler et O'Rourke [103] ont initialement proposé d'épaissir artificiellement une flamme laminaire de prémélange afin de pouvoir la propager sur un maillage grossier. Par la suite, la méthode TF a été étendue au cas de la combustion turbulente [104, 105, 91, 106, 107, 108, 109, 110].

Avec cette méthode, la fraction massique de chaque espèce est résolue de façon indépendante, ce qui permet notamment de prendre en compte les effets de diffusion préférentielle entre les différentes espèces. L'équation de fraction massique pour chaque espèce k s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_k \frac{W_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \dot{\omega}_k \quad (6.4)$$

$$(6.5)$$

où $\dot{\omega}_k$ est le taux de réaction de l'espèce k . Une analyse dimensionnelle classique [111] montre que la vitesse de flamme laminaire S_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 sont contrôlées par la diffusivité thermique D_{th} et le terme source :

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th} A} \quad (6.6)$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (6.7)$$

où A est le coefficient pré exponentiel de la réaction exprimée par une formulation de type Arrhénius. Dans le cas d'une flamme laminaire épaissie, les diffusivités thermique D_{th} et moléculaire D_k sont multipliées par F , facteur d'épaississement, alors que le taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ et le taux de réaction $\dot{\omega}_F$ sont divisés par F . Ainsi, la vitesse du front de flamme reste égale à celle en DNS, mais l'épaisseur du front de flamme est multiplié par F . En résumé :

$$D_{th} \longrightarrow F D_{th} \quad (6.8)$$

$$D_k \longrightarrow F D_k \quad (6.9)$$

$$\dot{\omega}_T \longrightarrow \dot{\omega}_T / F \quad (6.10)$$

$$\dot{\omega}_k \longrightarrow \dot{\omega}_k / F \quad (6.11)$$

où $\dot{\omega}_T$ et $\dot{\omega}_k$ sont prédits par le schéma cinétique qui utilise une loi d'Arrhénius. Le facteur d'épaississement F est choisi en fonction de la taille de maille du maillage LES, pour que le front de flamme de la flamme épaissie puisse être suffisamment large pour être résolu directement sur le maillage LES.

L'équation de conservation des espèces devient après épaississement :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho F D_k \frac{W_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \frac{\dot{\omega}_k}{F} \quad (6.12)$$

$$\text{avec} \quad V_i^c = \sum_{k=1}^n F D_k \frac{W_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (6.13)$$

Toutefois, dans des écoulements turbulents, l'approche TF a pour effet de modifier le rapport entre l'échelle de longueur de la turbulence et l'épaisseur de flamme : les tourbillons de taille inférieure à $F\delta_L$ ne peuvent plus interagir avec la flamme. Le modèle TF doit alors être corrigé pour corriger ces effets dans les études faites en LES en introduisant une fonction d'efficacité de sous maille. La description de ce modèle complet est faite dans la Sec. 6.1.4.

6.1.4 Le modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente TFLES

Dans le modèle TFLES, le facteur d'épaississement F est appliqué à l'épaisseur de flamme, ce qui conduit à une modification du nombre de Damköhler de la flamme épaissie noté Da^1 , rapport à la flamme initiale non épaissie Da :

$$Da^1 = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t}{F\delta_L} \frac{S_L}{u'(l_t)} = \frac{Da}{F} \quad (6.14)$$

La zone de réaction de la flamme étant plus épaisse, la flamme devient moins sensible aux petites échelles turbulentes. Cela se traduit par une diminution du plissement du front de flamme par les petits tourbillons (Fig. 6.6), la surface de flamme est alors réduite et le taux de consommation des réactifs est sous-estimé. L'objectif du modèle TFLES est de corriger la perte de sensibilité de la turbulence de la flamme due à l'épaississement. Une des hypothèses du modèle suppose un régime de flammelette : l'épaisseur de flamme est plus petite que toutes les échelles de la turbulence. Dans le cas de flammelette, la turbulence modifie la structure de la flamme en augmentant son plissement et son étirement local. Le front de flamme turbulent se propage alors à une vitesse turbulente S_T égale à la vitesse de flamme laminaire S_L , pondérée par le rapport entre la surface plissée totale notée A_T et sa surface moyenne équivalente non plissée notée A . La vitesse turbulente s'écrit sous la forme [112] :

$$S_T = S_L I_0 \frac{A_T}{A} \quad (6.15)$$

où I_0 est le facteur d'étirement. Bray et Can (1991) définissent I_0 par la relation 6.16. Le rapport A_T/A correspond au plissement de la flamme.

$$I_0 = \frac{\bar{S}_c}{S_L} \quad \text{avec} \quad S_c = \frac{1}{\rho_R} \int \dot{\omega}_R d\xi \quad (6.16)$$

où $\bar{S}_c$ est la moyenne spatiale de la vitesse locale de consommation S_c , ρ_R est la densité des gaz brûlés, $\dot{\omega}_R$ est la taux local de consommation de la flamme et ξ est la direction normale au front de flamme.

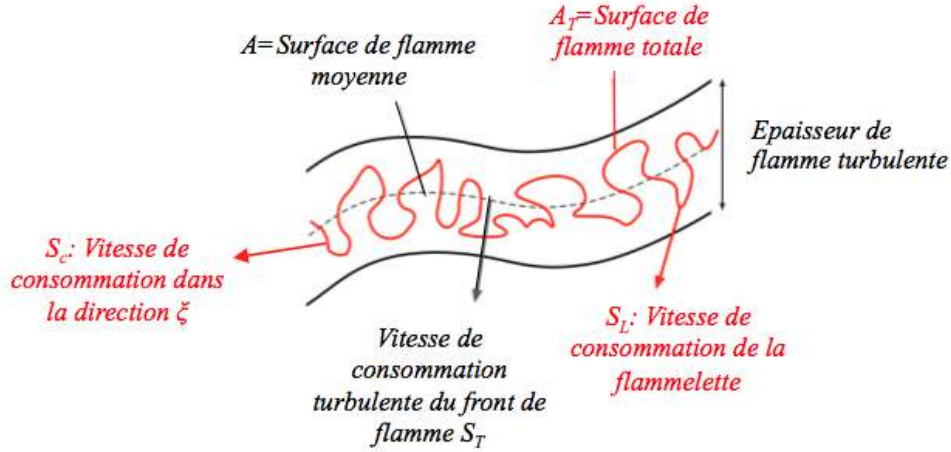


FIGURE 6.5 : Schéma représentant les surfaces de flamme totale A_T et moyenne A , la vitesse de consommation de la flammelette S_L ainsi que la vitesse turbulente du front de flamme S_T

Pour corriger l'épaississement du front de flamme, Colin *et al.* [91] proposent d'introduire **une fonction d'efficacité notée E** (Eq 6.17) définie comme le rapport entre le plissement de la flamme non épaissie Ξ_{δ_l} et de la flamme épaissie $\Xi_{\delta_l^1}$. Une hypothèse de ce modèle est que l'étirement dû à la turbulence augmente la surface de flamme mais la vitesse de consommation locale reste égale à la vitesse de flamme laminaire.

$$E = \frac{\Xi_{\delta_l}}{\Xi_{\delta_l^1}} \quad (6.17)$$

Les coefficients de diffusion thermique D_{th} , de diffusion massique D_k , le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ ainsi que le taux de dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ sont multipliés par la fonction d'efficacité E . Les Eq. 6.12 et 6.13 deviennent :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho (u_i + V_i^c) Y_k \right) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho F E D_k \frac{W_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \right) + \frac{E \dot{\omega}_k}{F} \quad (6.18)$$

$$\text{avec} \quad V_i^c = \sum_{k=1}^n F E D_k \frac{W_k}{M} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (6.19)$$

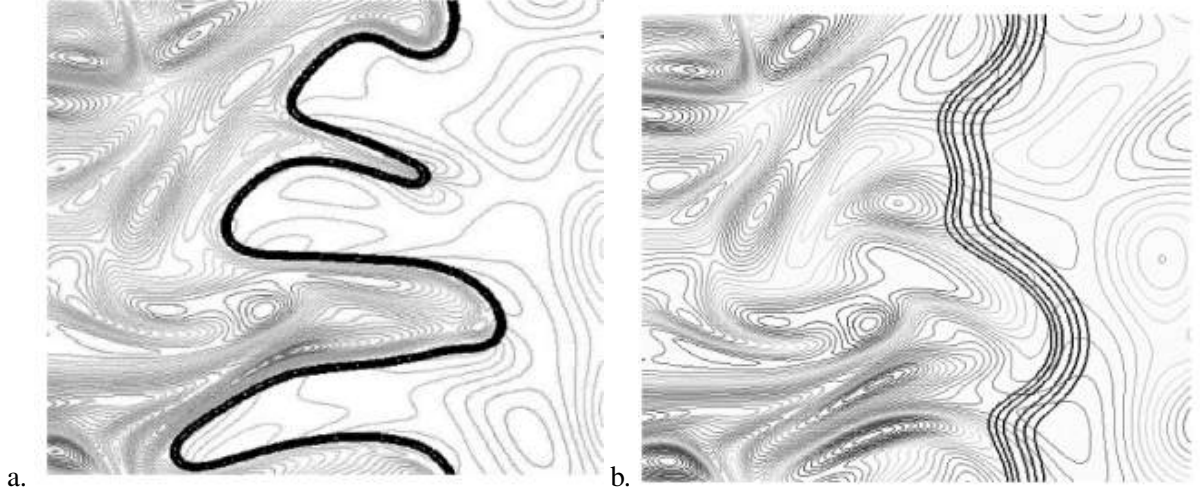


FIGURE 6.6 : DNS de l'interaction flamme/turbulence [104, 110] (a.) Flamme non épaissie, (b.) Flamme épaissie ($F = 5$)

6.1.5 La fonction d'efficacité de Colin

Le facteur de plissement de la surface de flamme $\Xi_{\Delta_e}^{Colin}$ est estimé à partir de la densité de surface de flamme $\bar{\Sigma}$, en supposant l'équilibre entre la turbulence et la surface de flamme de sous-maille :

$$\Xi_{\Delta_e}^{Colin} = 1 + \alpha_{Colin} \frac{\Delta_e}{S_L^0} \langle a_T^{sgs} \rangle \quad (6.20)$$

où $\langle a_T^{sgs} \rangle$ est le taux d'étirement de sous-maille, Δ_e est la taille du filtre et α_{Colin} est la constante du modèle. $\langle a_T^{sgs} \rangle$ est défini à partir de la taille du filtre Δ_e et de la fluctuation de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e} :

$$\langle a_T^{sgs} \rangle = \Gamma_{Colin} u'_{\Delta_e} / \Delta_e \quad (6.21)$$

La fonction Γ_{Δ_e} correspond à la prise en compte du taux d'étirement lié à toutes les échelles influencées par l'épaississement, c'est-à-dire toutes les échelles comprises entre l'échelle de Kolmogorov et la taille du filtre Δ_e [113] :

$$\Gamma_{\Delta_e} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) = 0.75 \exp \left[-\frac{1.2}{(u'_{\Delta_e}/S_L^0)^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (6.22)$$

La constante du modèle α_{Colin} est estimée afin de retrouver la théorie de Damköhler lorsque la flamme est plissée par toutes les échelles de la turbulence. Le plissement Ξ tend vers un

plissement maximum Ξ_{max} défini à partir des fluctuations de vitesse u' :

$$\Xi_{max} = 1 + \beta \frac{u'}{s_l^0} \quad (6.23)$$

La constante α_{Colin} de l'Eq. 6.20 se calcule alors à partir de :

$$\alpha_{Colin} = \beta_{Colin} \frac{2 \ln(2)}{3c_{ms} (Re_T^{1/2} - 1)} \quad (6.24)$$

où β_{Colin} est une constante du modèle de l'ordre de l'unité et c_{ms} est une autre constante du modèle et a été estimée à 0.28 par des simulations DNS réalisées par Yeung *et al.* [114]. Le nombre de Reynolds turbulent Re_T s'écrit :

$$Re_T = \frac{u' l_t}{\nu} \quad (6.25)$$

$$\Xi_{\Delta_e}^{Colin} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}, Re_T \right) = 1 + \beta_{Colin} \frac{\ln(2)}{2c_{ms} (Re_T^{1/2} - 1)} \exp \left[-\frac{1.2}{(u'_{\Delta_e}/S_L^0)^{0.3}} \right] \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0} \right)^{\frac{2}{3}} \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \quad (6.26)$$

Enfin, la fonction d'efficacité E est définie comme le rapport entre le plissement de la flamme non épaissie et le plissement de la flamme épaissie :

$$E = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_L^1)} = \frac{\Xi_{\Delta_e}^{Colin} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}, Re_T \right)}{\Xi_{\Delta_e}^{Colin} \left(\frac{\Delta_e}{F\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}, Re_T \right)} = \frac{1 + \alpha \Gamma_{\Delta_e} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}}{1 + \alpha \Gamma_{\Delta_e} \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^1}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0}} \quad (6.27)$$

S_L^0 est la vitesse de propagation du front de la flamme non épaissie et δ_L^0 son épaisseur. L'épaisseur de la flamme épaissie est définie par : $\delta_L^1 = F\delta_L^0$, où F est le facteur d'épaississement.

Pour que la vitesse turbulente de propagation de la flamme S_T soit correctement prédite dans le cas de flammes prémélangées, la fonction d'efficacité est telle que : $S_T = E S_L^0$. E varie entre 1 (ce qui correspond à un faible niveau de turbulence) et $E_{max} \simeq F^{2/3}$ (plissement important à l'échelle de la sous-maille).

Pour que les tourbillons plus petits que cette taille n'affectent pas le plissement de la flamme, Colin *et al.* [91] ont défini une longueur de coupure δ_L^c . La fonction d'efficacité est donc sollicitée si la taille caractéristique d'un tourbillon r est telle que :

- dans le cas d'une flamme non épaissie : $\delta_L^c < r < \delta_L^0$,
- dans le cas d'une flamme épaissie : $\delta_L^c < r < \delta_L^1$.

La constante β_{Colin} qui intervient dans l'Eq. 6.26 est fixée typiquement fixée à 0.3 dans le

code AVBP. Cette valeur de la constante a dû être ajustée dans le cadre de cette thèse du fait que les simulations LES ont été réalisées avec le schéma numérique Lax Wendroff. Les calculs ont été faits avec $\beta_{Colin} = 2$ qui est la valeur utilisée typiquement pour la LES de moteurs à piston quand on emploie le modèle Lax Wendroff [115].

6.1.6 Le modèle de flamme épaissie dynamique DTFLES

Le modèle de flamme épaissie décrit dans la Sec. 6.1.4 est approprié pour le calcul de flammes parfaitement prémélangées. Pour les flammes partiellement prémélangées, en revanche, ce modèle doit être ajusté pour ne pas perturber les processus de mélange à l'extérieur de la zone de réaction. C'est en particulier le cas pour les flammes apparaissant dans le CVC : l'injection de carburant gazeux en amont de la chambre de combustion menant à une carburation de la chambre relativement bien homogène mais présentant cependant une stratification qui doit être prise en compte dans un modèle LES précis.

En d'autres termes, dans les zones non réactives où seul le mélange se produit, les diffusions thermiques et moléculaires sont surestimées d'un facteur F . Dans ces régions, le facteur d'épaississement doit donc valoir $F = 1$. Dans la flamme, l'épaississement permet de résoudre les termes diffusifs et les termes sources. Ainsi, les termes de sous-maille doivent être annulés dans le front de flamme.

Le modèle TFLES est adapté dans la zone de flamme mais doit être corrigé hors de cette région. Le modèle de flamme épaissie dynamique (DTF pour *Dynamically Thickened Flame*) a été développé pour tenir compte de ces corrections [106]. Dans ce modèle schématisé sur la Fig. 6.7, l'épaississement F varie entre F_{max} dans la zone réactive et $F = 1$ ailleurs.

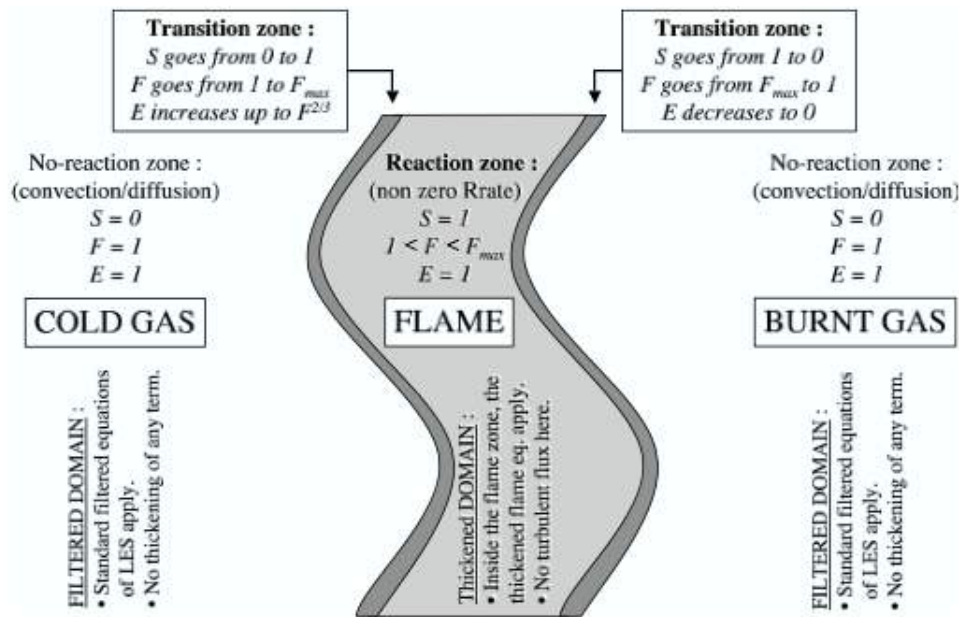


FIGURE 6.7 : Principe de fonctionnement de l'épaississement dynamique DTF

L'épaississement dynamique F est défini par :

$$F = 1 + (F_{max} - 1) S \quad (6.28)$$

Le senseur S dépend localement des fractions massiques et de la température. S évalue si la zone est réactive ($S = 1$) ou non ($S = 0$) à l'aide de la fonction de présence Ω utilisant des paramètres similaires à ceux du schéma cinétique :

$$S = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \quad \text{avec : } \beta' = 500 \quad (6.29)$$

$$\text{et } \Omega = Y_F^{\nu_F'} Y_O^{\nu_O'} \exp\left(-\Gamma_T \frac{E_a}{RT}\right) \quad (6.30)$$

Le paramètre Γ_T est utilisé pour enclencher la fonction d'épaississement avant la réaction et vaut typiquement : $\Gamma_T = 0.5$. Ω_0 est déterminé en calculant le maximum de Ω dans une flamme laminaire prémélangée stœchiométrique 1D non épaissie.

Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale

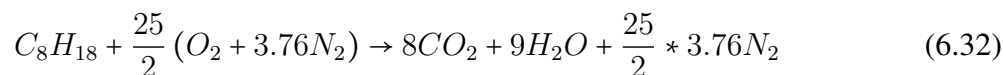
Dans les calculs LES où la taille des mailles peut varier beaucoup, il est pratique d'adapter le facteur d'épaississement au maillage local. Pour ce faire, on évalue F_{max} selon l'expression suivante :

$$F_{max} = n \frac{\delta_L^0}{\Delta x} \quad (6.31)$$

où Δx est la taille locale de la maille et n est le nombre de cellules contenues dans l'épaisseur du front de flamme épaissi. La valeur $n = 5$ est généralement suffisante pour résoudre correctement le front de flamme en évitant les erreurs numériques dues à des gradients mal résolus.

6.2 Cinétique chimique

La réaction globale de la combustion de l'isooctane de formule chimique C_8H_{18} peut s'écrire :

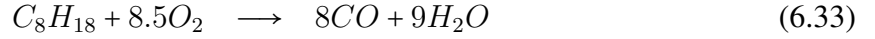


L'Eq. (6.32) présente un bilan de matière simple entre les réactifs et les produits. En réalité, le processus de combustion est beaucoup plus complexe, et passe par de nombreuses étapes intermédiaires appelées réactions élémentaires, qui s'enchaînent jusqu'à épuisement des réactifs. Par exemple, la réaction de l'isooctane dans l'air tel qu'elle est décrite dans le mécanisme

Jerzembeck [57] consiste en plus de 601 réactions impliquant 99 espèces, ou encore la réaction du méthane dans l'air décrite à partir de 325 réactions et 53 espèces dans le mécanisme GRI-MECH 3.0 [116]. Ces schémas détaillés peuvent seulement être utilisés pour des configurations simples, comme des calculs de flammes 1D laminares.

Pour la LES ou la DNS, l'utilisation de ces mécanismes détaillés impliquerait des coûts de calcul excessifs. Une solution consiste à simplifier ces schémas afin de ne reproduire qu'une partie des caractéristiques de la flamme mais à un coût réduit. Ainsi, des mécanismes à deux étapes permettent de reproduire la vitesse de flamme, la température adiabatique de flamme et l'épaisseur du front de flamme pour des flammes turbulentes prémélangées. Les phénomènes cinétiques importants sont captés mais le sur coût est faible pour la LES car seulement deux équations différentielles supplémentaires sont nécessaires.

Pour l'isooctane, un schéma deux étapes, noté *2S C8H18 LL*, a été développé dans le cadre de cette thèse :



Le taux de réaction traduisant l'oxydation de l'isooctane est noté $k_{f,1}$ tandis que le taux de réaction relatif (forward) à l'équilibre entre CO et CO_2 est noté $k_{f,2}$. Ils s'expriment :

$$k_{f,1} = A_1 e^{\frac{-E_{a,1}}{RT}} [C_8H_{18}]^{n_{C_8H_{18}}} [O_2]^{n_{O_2,1}} \quad (6.35)$$

$$k_{f,2} = A_2 e^{\frac{-E_{a,2}}{RT}} [CO]^{n_{CO}} [O_2]^{n_{O_2,2}} \quad (6.36)$$

où A_i est la constante pré-exponentielle, $E_{a,i}$ est l'énergie d'activation de la réaction i et $n_{k,i}$ sont les exposants de l'espèce k dans la réaction i (Tab. 6.1). La constante $k_{r,2}$ de la réaction 6.34 est calculée à partir de $k_{f,2}$ et de la constante d'équilibre $k_{eq,2}$ définie par Kuo [117] (Eq. A-14).

TABLE 6.1 : Arrhenius parameters for the *C8H18* 2 step scheme.

Reaction	A [cm ³ /mol.s]	E _a [cal/mol]	Reaction exponents n _k [-]	
C₈H₁₈ oxidation	9.443 × 10 ¹²	3.6 × 10 ⁴	$n_{C_8H_{18}} = 1.1$	$n_{O_2,1} = 0.54$
CO-CO₂ equilibrium	2.0 × 10 ⁹	1.4 × 10 ⁴	$n_{CO} = 1.0$	$n_{O_2,2} = 0.5$

Afin de valider le schéma *2S C8H18 LL*, une comparaison avec le mécanisme détaillé de Jerzembeck [57] est réalisée sur un calcul de flamme 1D d'un mélange C_8H_{18} à $P_0 = 3$ bars et $T_0 = 400$ K. Le code CANTERA est utilisé pour comparer les deux schémas sur une plage de

richesse [0.5-1.5].

Les Figs. 6.8 et 6.9 montrent que le schéma réduit $2S\ C8H18\ LL$ reproduit correctement la vitesse laminaire de flamme ainsi que la température adiabatique de gaz brûlés pour des richesses inférieures à 1.1. Pour le CVC, il a donc fallu modifier ce schéma. Pour cela, Franzelli [118] a développé une méthodologie pour améliorer les résultats de vitesse de flamme et de température adiabatique pour des schémas réduits à deux étapes en combustion riche : elle est appelée PEA (Pre-Exponential Adjustment) [106, 119] et introduit deux fonctions $f_1(\phi)$ et $f_2(\phi)$ devant les constantes pré-exponentielles : $A_1 = f_1 A_1$ et $A_2 = f_2 A_2$, ϕ étant la richesse du mélange. Ces fonctions s'expriment suivant :

$$f_1(\phi) = \frac{2}{\left[1 + \tanh\left(\frac{\phi_{0,1} - \phi}{\sigma_{0,1}}\right)\right] + B_1 \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{1,1}}{\sigma_{1,1}}\right)\right] + C_1 \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{2,1}}{\sigma_{2,1}}\right)\right]} \quad (6.37)$$

$$f_2(\phi) = \frac{1}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi_{0,2} - \phi}{\sigma_{0,2}}\right)\right] + \frac{B_2}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{1,2}}{\sigma_{1,2}}\right)\right] + \quad (6.38)$$

$$\frac{C_2}{2} \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi - \phi_{2,2}}{\sigma_{2,2}}\right)\right] * \left[1 + \tanh\left(\frac{\phi_{3,2} - \phi}{\sigma_{3,2}}\right)\right] \quad (6.39)$$

Les coefficients utilisés avec le schéma $2S\ C8H18\ LL$ sont résumés dans la Tab. 6.2.

TABLE 6.2 : Coefficients pour les fonctions correctrices f_1 et f_2 intervenant dans le schéma $2S\ C8H18\ LL$

	$\phi_{0,j}$	$\sigma_{0,j}$	B_j	$\phi_{1,j}$	$\sigma_{1,j}$	C_j	$\phi_{2,j}$	$\sigma_{2,j}$	$\phi_{3,j}$	$\sigma_{3,j}$
j=1	1.28	0.2	0.1	1.52	0.02	4	1.42	0.24	-	-
j=2	1.15	0.08	0.0001	1.2	0.04	0.1	1.28	0.03	1.9	0.2

Comme le montre la Fig. 6.8, l'utilisation de la méthode PEA permet d'améliorer le calcul de la vitesse laminaire de flamme pour des richesses supérieures à 1.1.

6.3 Modélisation de l'allumage : l'allumage ED

Comme dans les moteurs à pistons, l'allumage dans une chambre CVC a une grande importance dans le déroulement de la phase de combustion. Il est assuré par une bougie dans le cas du thermoréacteur. De nombreux phénomènes complexes se succèdent suite à l'étincelle de la bougie [37]. Un plasma à haute température se forme lors de la décharge électrique, et initie un noyau de flamme (phase d'arc). Une faible partie de l'énergie électrique de la bougie est ensuite transmise au mélange, estimée entre 10 et 30 %, ce qui entraîne le déclenchement des réactions

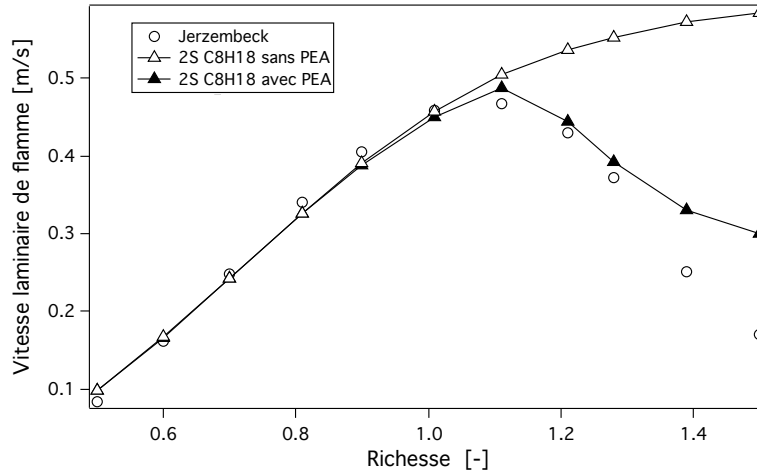


FIGURE 6.8 : Vitesse laminaire de flamme en fonction de la richesse pour un mélange C_8H_{18} - Air à $P_0 = 3$ bars et $T_0 = 400$ K. Comparaison du schéma à deux étapes 2S C_8H_{18} LL, avec et sans PEA par rapport au mécanisme détaillé de Jerzembeck.

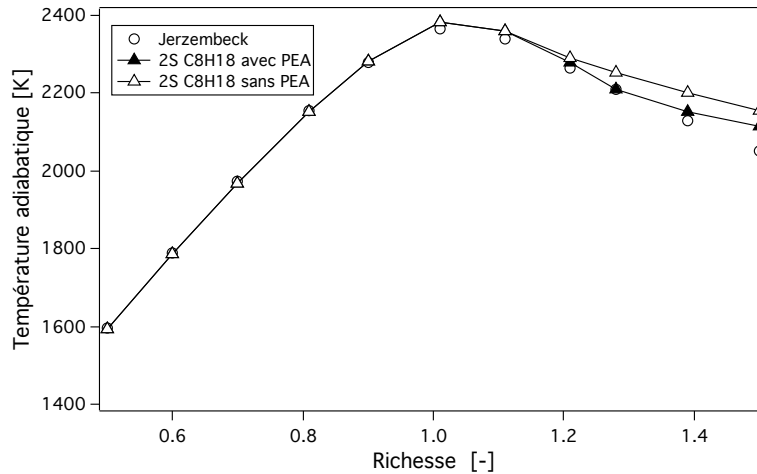


FIGURE 6.9 : Température adiabatique de flamme en fonction de la richesse pour un mélange C_8H_{18} - Air à $P_0 = 3$ bars et $T_0 = 400$ K. Comparaison du schéma à deux étapes 2S C_8H_{18} LL, avec et sans PEA par rapport au mécanisme détaillé de Jerzembeck.

chimiques. Les modèles d'allumage disponibles en LES permettent uniquement de reproduire cette dernière ultime étape où la plus grande partie de l'énergie est déposée.

Dans cette thèse, le modèle de dépôt d'énergie (ED pour *Energy Deposition*) proposé par Lacaze *et al* [33] est utilisé. De nombreuses études ont fait appel à ce modèle d'allumage, dans des domaines variés comme les turbines à gaz [120, 121], les moteurs fusée [122], les flammes de jet [33] ou encore les moteurs à pistons [26, 22, 23]. D'autres modèles d'allumage sont utilisés [123, 35, 30] mais la formulation ED formulation est la plus adaptée avec le modèle TFLES.

Le modèle ED consiste à ajouter un terme source volumique $\dot{Q}$ à l'équation de l'énergie (Eq. 3.12). Ce terme source est représenté par une fonction gaussienne en temps et en espace, centrée sur la position de la bougie. Si t_i est l'instant d'allumage et ϵ_i l'énergie totale déposée dans l'écoulement, le terme source $\dot{Q}$ s'écrit [33] :

$$\dot{Q} = \frac{\epsilon_i}{4\pi^2\sigma_s^3\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{\sigma_s}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_i}{\sigma_t}\right)^2} \quad (6.40)$$

σ_s et σ_t contrôlent l'étendue spatiale et temporelle du dépôt et s'écrivent :

$$\sigma_s = \frac{\Delta_s}{a} \quad (6.41)$$

$$\sigma_t = \frac{\Delta_t}{a} \quad \text{avec} \quad a = 4\sqrt{\ln(10)} \quad (6.42)$$

Par construction, 98 % de l'énergie est déposée dans une sphère de rayon Δ_s sur un temps Δ_t : $\int_0^{\Delta_s} \int_{t_i-\Delta_t}^{t_i+\Delta_t} \dot{Q} 4\pi r^2 dr dt = 0.98 \int_0^\infty \int_0^\infty \dot{Q} 4\pi r^2 dr dt = 0.98\epsilon_i$. La valeur de l'énergie totale déposée dans les gaz ϵ_i dépend de la puissance électrique envoyée à la bougie E : $\epsilon_i = kE$ où k est un coefficient de pertes que l'on fixera à 0.8.

Lors des essais expérimentaux réalisés à Pprime, E est de l'ordre de 300 mJ, ce qui est beaucoup plus que l'énergie minimale nécessaire dans ce type d'écoulement (de l'ordre de 30 mJ) [45]. Pendant la phase de dépôt d'énergie, le modèle TFLES n'est pas activé : l'épaississement de la flamme ne se déclenche qu'à partir d'une température proche de la température adiabatique de flamme.

6.4 Résultats calculs à chaud : variabilité cycle à cycle

6.4.1 Analysis of reacting CVC point OP2 (1200 rpm)

The reacting point OP2 (Table 5.3) corresponds to the same condition as OP1. 40 cycles (N=1200 rpm) burn per second and ignition takes place at intake valve closure : $\theta = 125^\circ$ (Table 6.3). The total isoctane injection rate is 160 mg/cycle (mean equivalence ratio = 1.2).

TABLE 6.3 : Experimental and simulation parameters for reacting cases OP2 and OP3

Operating point	Rotation speed (rpm)	Fuel	Mass of fuel injected per cycle [g]	Ignition angle θ_{igni} [deg]	Spark energy [mJ]
OP2	1200	C_8H_{18}	0.160	125	300
OP3	1500	C_8H_{18}	0.160	125	300

Flame propagation

Figure 6.10 shows the flame propagation during one of the experimental cycles at the operating point OP2 (images provided by Pr. Bellenoue and Dr. Boust, Poitiers). After spark ignition, the flame propagates quickly from the ignition point (IP in Fig. 6.10). The flame is very corrugated, indicating a highly turbulent flow inside the chamber. After $\theta = 149^\circ$ (Fig. 6.10e), yellow spots indicate soot formation at the end of the cycle.

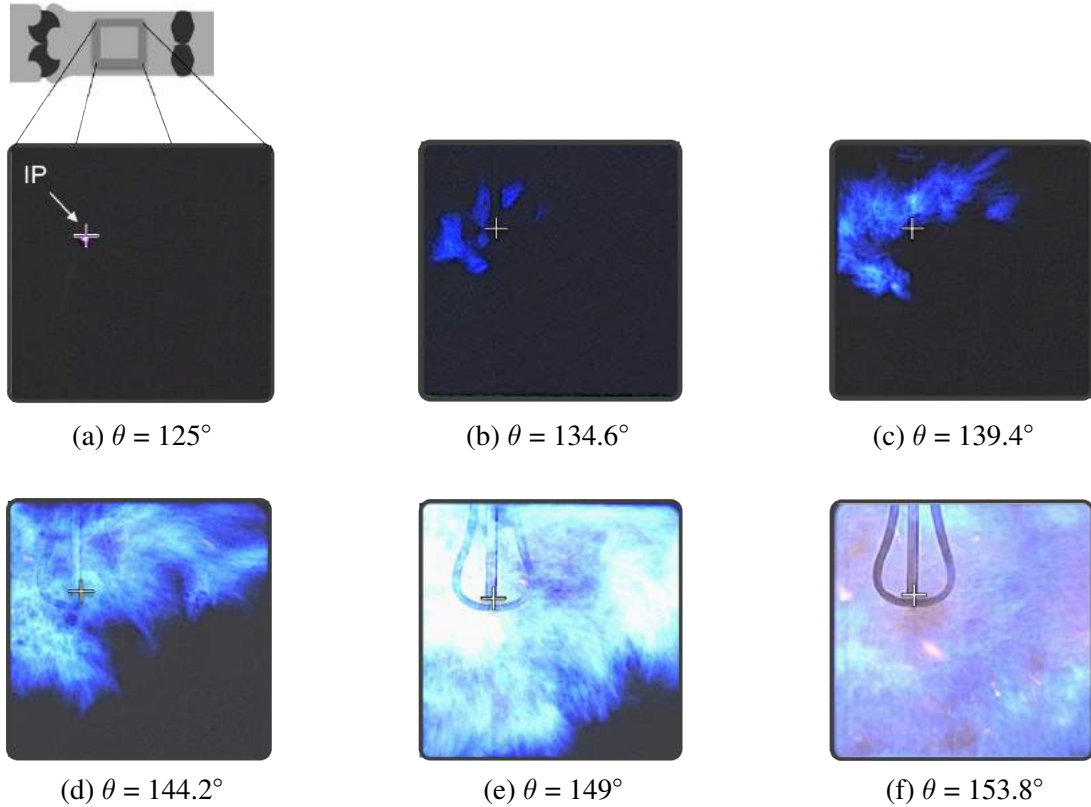


FIGURE 6.10 : *Experimental results : flame propagation for one cycle for OP2. IP indicates the point where the spark is produced (source : Pprime laboratory.)*

Pressure evolution in the combustion chamber

As in spark ignition piston engines, cyclic fluctuations are observed on pressure time-evolutions (Fig. 6.11). The theoretical maximum pressure P_{adia}/P_{air} which should be reached at constant volume for a perfect volumetric efficiency can be calculated in an equilibrium code like Cantera [58] and is $P_{adia}/P_{air} = 7.5$ (for constant volume combustion, equilibrium computations at the equivalence ratio of OP2 provide a temperature variation T_{adia}/T_{air} of 6.5 and a pressure increase P_{adia}/P_{air} of 7.5). The pressure curves measured experimentally vary from cycle to cycle and Fig. 6.11 displays the mean pressure curve as well as the maximum and minimum pressure curves obtained for all experimental cycles (80 cycles were used experimentally to construct these curves) leading to two observations :

- The maximum pressure reached in the experiment (from 2.7 to 4.5, depending on the cycle) is always lower than the theoretical value $P_{adia}/P_{air} = 7.5$, showing that the expected efficiency is not reached.
- Strong cycle-to-cycle variations and even almost complete misfires are observed experimentally. These phenomena are very similar to cyclic variations obtained in high performance piston engines [22, 23, 26] and indicate that the turbulent combustion phase in this system is unstable either because ignition is too long or too weak or because the turbulent propagation speed varies from cycle to cycle [40].

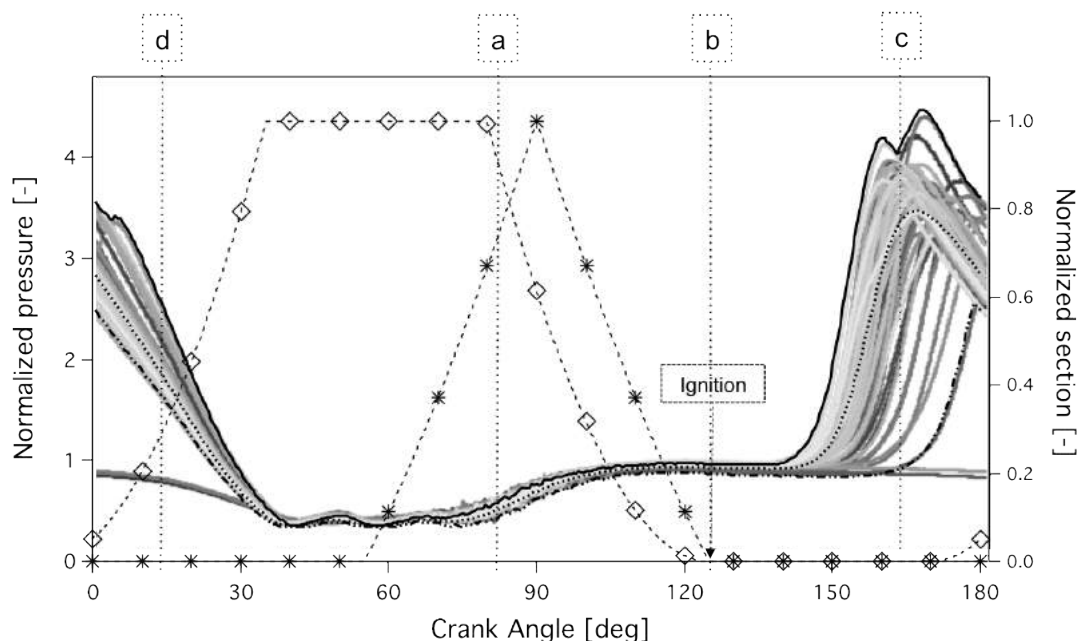


FIGURE 6.11 : Experimental results for reacting case OP2. (grey shaded solid lines) Pressure in the combustion chamber over 80 cycles. (—) Experimental maximum pressure in the combustion chamber. (- - -) Experimental minimal pressure in the combustion chamber. (.....) Experimental mean pressure in the combustion chamber. (*) Intake section. (◇) Exhaust section.

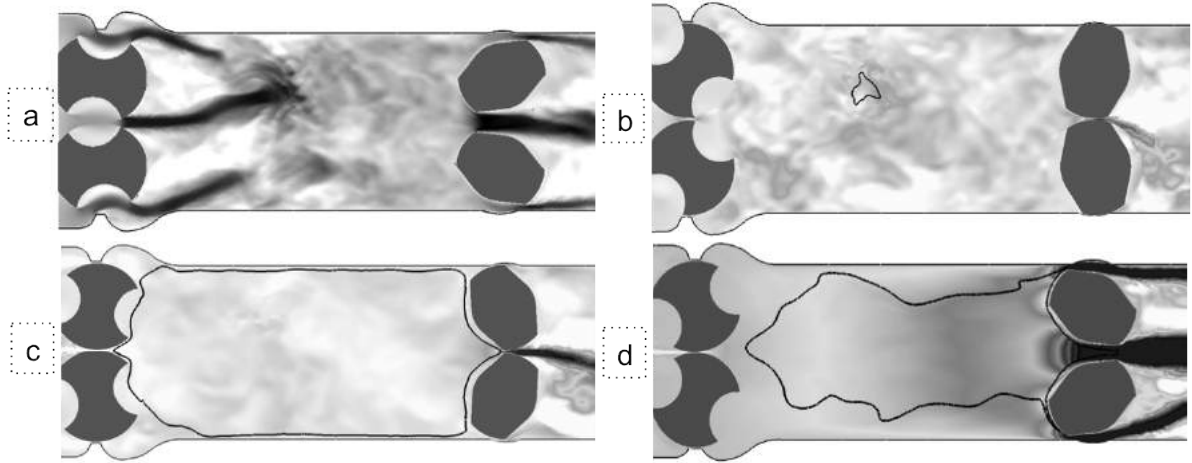


FIGURE 6.12 : *OP2 - LES results : flame position (isolevel of temperature : $T = 1800K$) superimposed to the axial velocity field (velocity magnitude from 0 to 100 m/s). (a) Intake ($\theta = 82^\circ$). (b) Ignition ($\theta = 125^\circ$). (c) End of combustion phase ($\theta = 171^\circ$). (d) Exhaust ($\theta = 13^\circ$).*

Two questions are addressed in the next sections : (1) which losses can explain the fact that pressure is less than expected and (2) where do the cycle-to-cycle variations come from ?

Like in a piston engine, multiple factors may explain that the maximum pressure is lower than expected : fuel stratification during the intake phase, scavenging difficulties leading to high level of residual burned gases from the previous cycle, incomplete combustion, failed or unsufficient ignition, excessive heat losses can decrease the cycle efficiency. The problem of cyclic variations has been studied in engines for a very long time [124, 125] and has not been solved yet [126, 26]. Obviously, turbulence and the associated flow randomness at the moment of spark timing play a major role. Since CVC flows must have large turbulence intensity to promote fast combustion, it is logical to also expect cycle to cycle variations.

Figure 6.12 displays velocity fields and flame position for one cycle for OP2. Instants *a*, *b*, *c* and *d* (Fig. 6.12) correspond respectively to the moment of maximum velocity at intake (*a*), 0.5 ms after spark timing (*b*), the end of combustion phase (*c*), and the moment of maximum velocity during the exhaust phase (*d*).

The velocity decay after the inlet valves close is especially clear between instants (*a*) and (*b*) : the maximum velocity at inlet (*a*) is 440 m/s but it has already decayed to 30 m/s at spark timing in Fig. 6.12b. Combustion is fast for this cycle : 90% of the fuel is burned in less than 50 degrees between instants (*b*) and (*c*). Moreover, like in piston engines, some fresh gases remain trapped between the walls and the flame front : they become visible in Fig. 6.12d when the pressure decreases during the exhaust phase.

LES also revealed significant cyclic variations : pressure curves (Fig. 6.13) for the 25 cycles computed with LES fall within the range of experimental data. The maximum normalized pressure P_{cc}/P_{air} reached in the LES varies from 2.7 to 4.5 for cycles which burn but, like in the experiment, certain cycles do not burn at all in the simulation.

Experimental results suggest that the cyclic variations observed in Fig. 6.13 are mostly linked to the initial conditions of individual cycles in terms of velocity field and mixture composition. For example, the flame kernel created after spark ignition is subject to a high variability (Fig. 6.14) : 10° after ignition, the kernel position is moved by more than 2 cm between two cycles. The left image of Fig. 6.14 shows a flame which propagates to the right side of the chamber while the right one reveals a flame going left. The reasons which can lead to such variability can be investigated using LES data where two explanations were tested :

- velocity fluctuations near the spark
- residuals and local mixing fluctuations

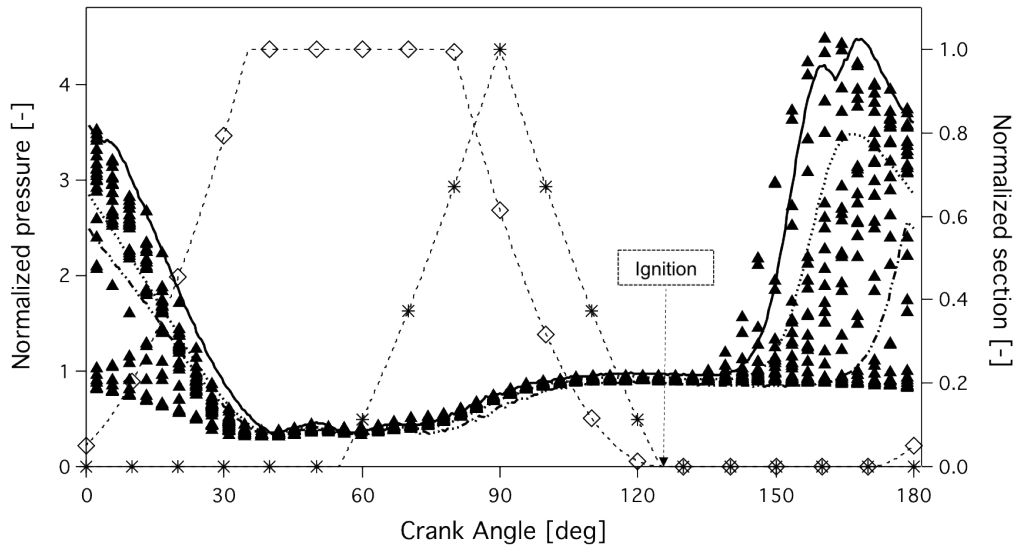


FIGURE 6.13 : LES (individual cycles) and experimental (envelope) results for reacting case OP2 - Pressure evolution as a function of cycle angle for 25 consecutive cycles. ($\blacktriangle$) LES pressure in the combustion chamber. (—) Experimental maximum pressure in the combustion chamber. (---) Experimental minimal pressure in the combustion chamber. (.....) Experimental mean pressure in the combustion chamber. (*) Intake section. ($\diamond$) Exhaust section.

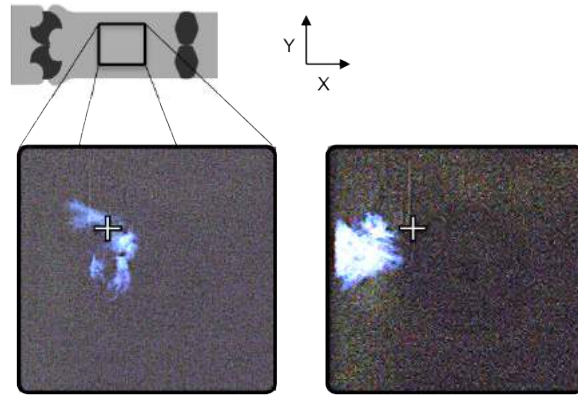


FIGURE 6.14 : OP2 - Flame kernel variability between two experimental cycles – $\theta = 135^\circ$. The + sign indicates the spark position.

Influence of velocity fluctuations

Figure 6.15 displays the absolute velocity at the spark location versus crank angle for all LES cycles. The variability is obvious even before sparking : variations of 10 to 40 m/s are observed between individual cycles. This indicates that the flow within the CVC chamber differs much from cycle to cycle : this is clearly a possible source of cyclic variations for the combustion phase. It can be checked by plotting scatter graphs of the maximum cycle pressure versus local

velocity at spark timing near the spark. Figure 6.16 shows that a correlation exists between these quantities : the maximum pressure of a given cycle goes down when the flow velocity at spark timing increases.

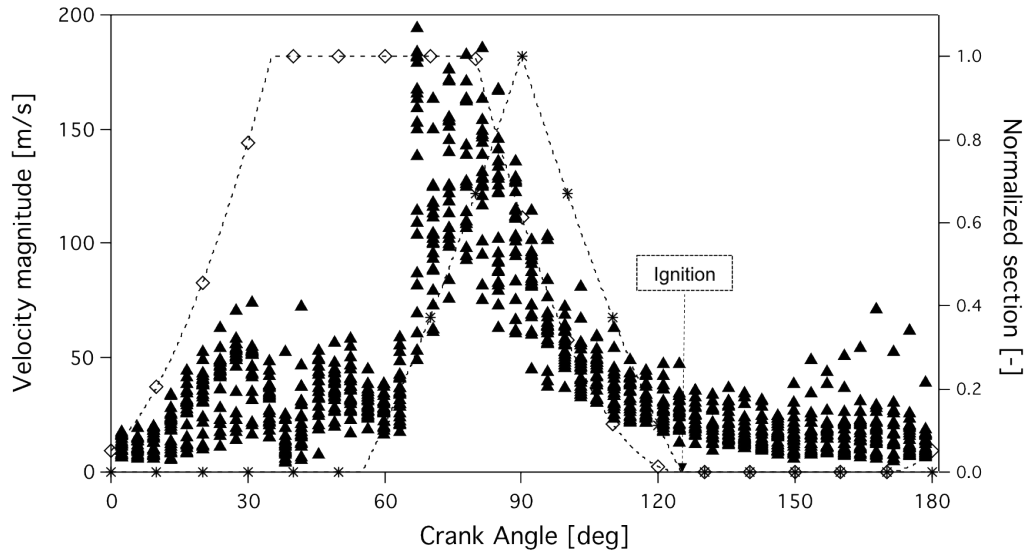


FIGURE 6.15 : OP2 - (▲) Evolution of the velocity magnitude at the spark location (averaged over a sphere of 1cm radius) versus cycle angle. (*) Intake section. (◇) Exhaust section.

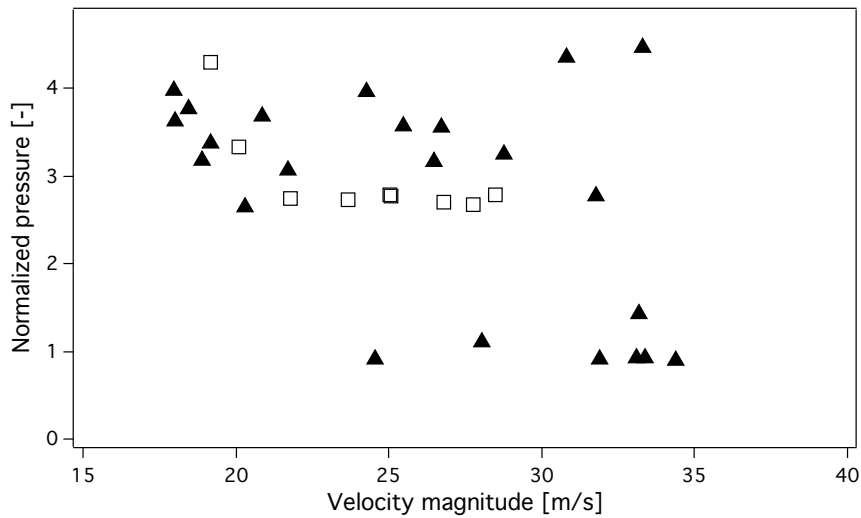


FIGURE 6.16 : OP2 - Maximum pressure versus LES velocity magnitude. (▲) LES magnitude of the velocity at the spark location (averaged over a sphere of 1cm radius). (□) LES magnitude of the velocity averaged over the full chamber.

To investigate the relationship between velocity at spark timing ($\theta = 125^\circ$ and maximum pressure, three consecutive cycles (C9, C10, and C11) are compared in Fig. 6.17 at two crank angles : $\theta = 129^\circ$ (4° after spark timing) and $\theta = 139^\circ$ (10° later). The comparison reveals different behaviors in terms of peak pressure (Fig. 6.18) and turbulence flow at spark timing (Fig. 6.19). Cycle C9 is igniting and propagating very rapidly in the whole chamber. Cycle C10 on the other hand is totally quenched and will lead to misfire. Cycle C11 is late compared to C9 but finally burns as indicated by its maximum normalized pressure of 3.5 (Fig. 6.18).

The C9 cycle begins with a low velocity in the spark region (Fig. 6.19) and experiences a fast combustion process. For cycle C10, a residual tumble motion at spark timing (Fig. 6.17) leads to a high level of turbulence at spark location (Fig. 6.19) which prevents the kernel to develop and finally leads to a total misfire as seen in the middle image of Fig. 6.17. This analysis shows the influence of turbulence at spark timing on the flame propagation : for cycles with a high velocity at spark timing, the initial flame kernel is quenched and the flame can not propagate in the chamber ; cycles which start in a lower turbulence activity result in higher pressures.

Up to now, the analysis has focused on correlations between the performance of one cycle and the flow characteristics at the beginning of the same cycle. LES reveals however that cycle (N+1) actually depends strongly on cycle N. For example, an intense combustion cycle like C9 generates an intense turbulence during the exhaust phase, and a high velocity at spark timing for the next cycle (C10) indicating a possible oscillatory mechanism between consecutive cycles. Figure 6.20 displays the absolute velocity (averaged over the chamber) at spark timing for cycle (N+1) versus the maximum pressure of the previous cycle N : cycles with an intense combustion (high maximum pressure) appear to cause high velocities for the next cycle. To determine whether cycle N influences the combustion process of cycle (N+1) (Fig. 6.21), the maximum pressure reached during cycle (N+1) is plotted versus the maximum pressure of the previous cycle N. This is done for both experimental and LES results in Fig. 6.22, which shows that an intense high pressure cycle is often followed by a low pressure cycle. Cycles are not independent and Fig. 6.22 actually reveals two families of cycles :

- stable cycles where cycles burning normally follow each other : both maximum pressure reached during cycle N and maximum pressure reached during cycle (N+1) are high.
- unstable cycles, either weak or strong, where a strongly burning cycle N leads to a weakly burning cycle (N+1) and vice versa.

This situation differs from cyclic variations in piston engines which are mainly due to random velocity excursions and no coupling appears between consecutive cycles [26, 127, 128]. The main reason for this is the absence of compression phase in the CVC chamber : this phase dissipates turbulence as well as mean velocities in piston engines very strongly and contributes to isolate cycles from each other. It does not exist in a CVC chamber.

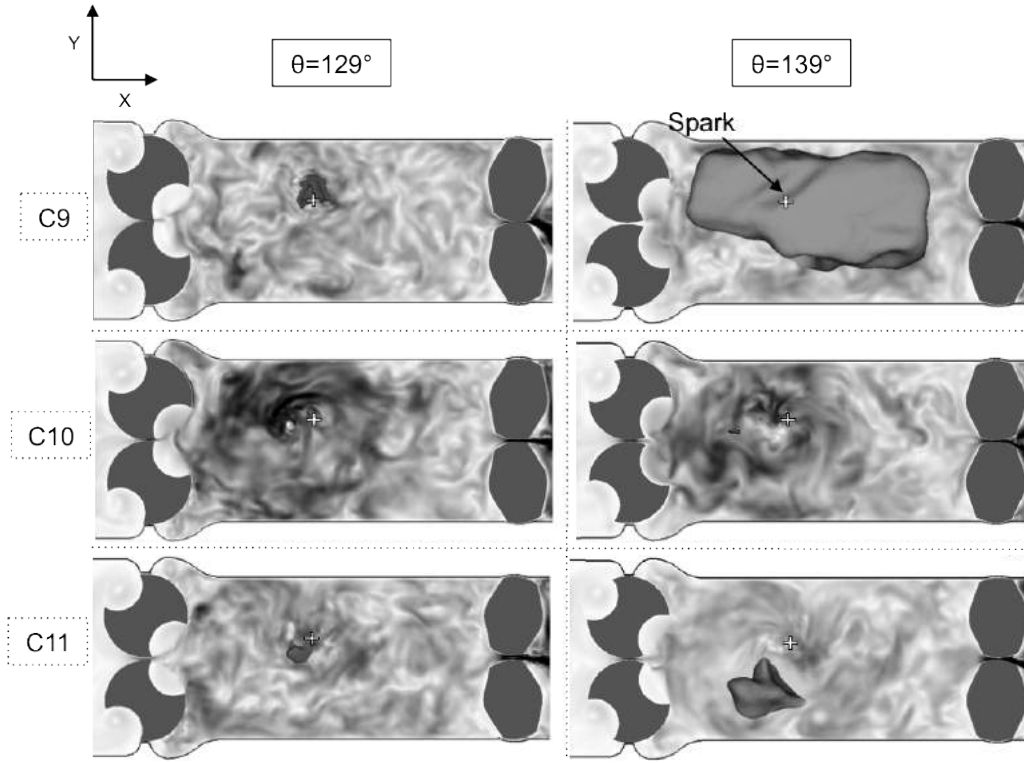


FIGURE 6.17 : OP2 - Comparison of the flame propagation (isosurface of temperature : $T = 1800\text{K}$) between three cycles (C9 C10 C11) superimposed to the field of velocity (velocity magnitude from 0 to 60 m/s) – Left : $\theta = 129^\circ$. Right : $\theta = 139^\circ$.

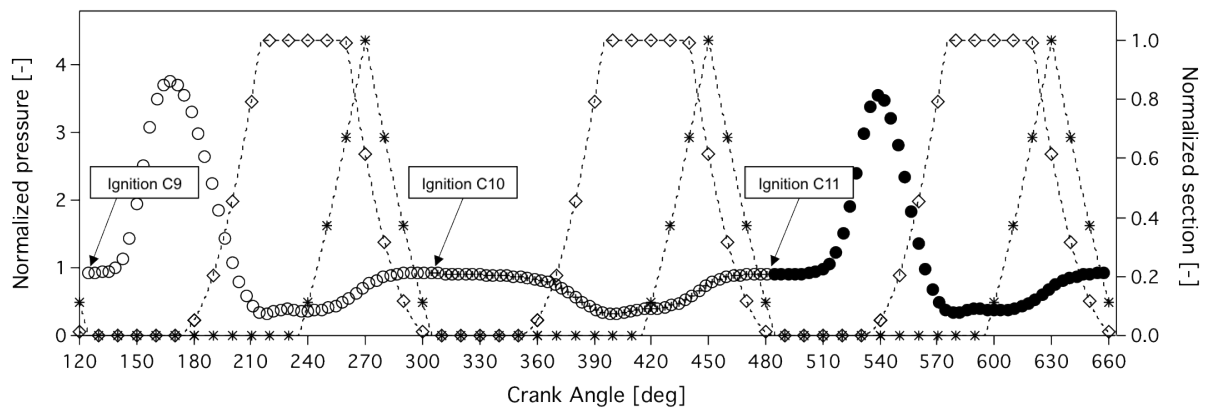


FIGURE 6.18 : OP2 - Normalized pressure evolution versus cycle angle for the three cycles C9, C10 and C11. ($\circ$) C9. ($\diamond$) C10. ($\bullet$) C11. (*) Intake section. ($\diamond$) Exhaust section.

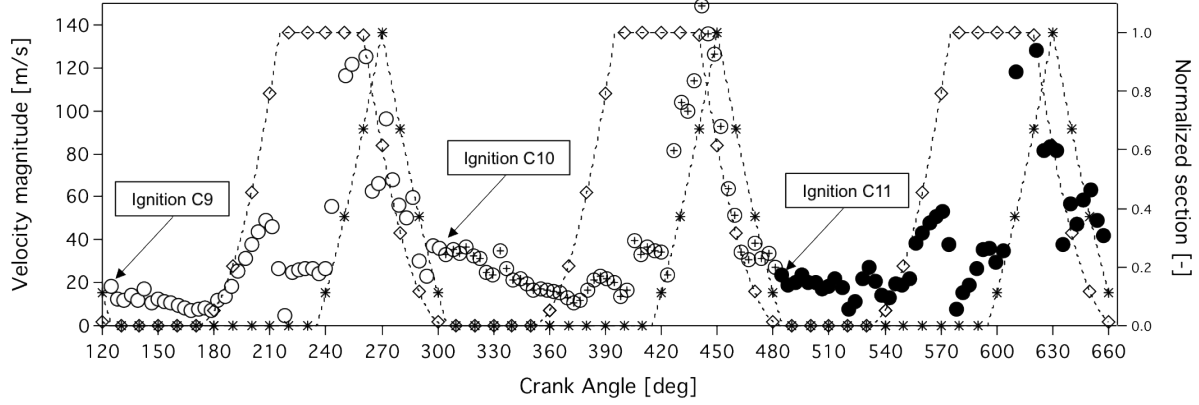


FIGURE 6.19 : OP2 - Evolution of the velocity magnitude at the spark location versus cycle angle for the three cycles C9, C10 and C11. ($\circ$) C9. ($\oplus$) C10. ($\bullet$) C11. (*) Intake section. ($\diamond$) Exhaust section.

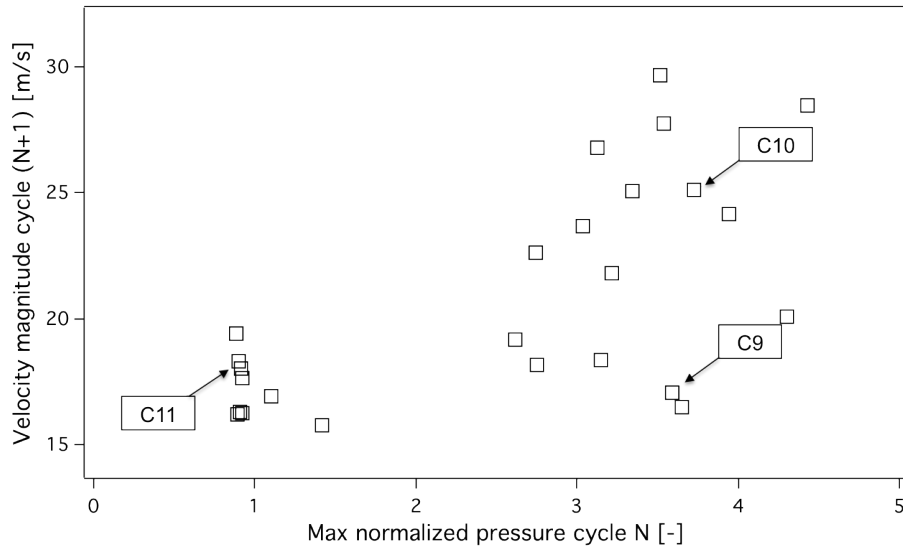


FIGURE 6.20 : OP2 - Evolution of the velocity magnitude averaged over the chamber for cycle (N+1) versus maximum pressure for cycle N. Example : the C9 point coordinates are (maximum pressure of cycle C8, velocity magnitude of cycle C9).

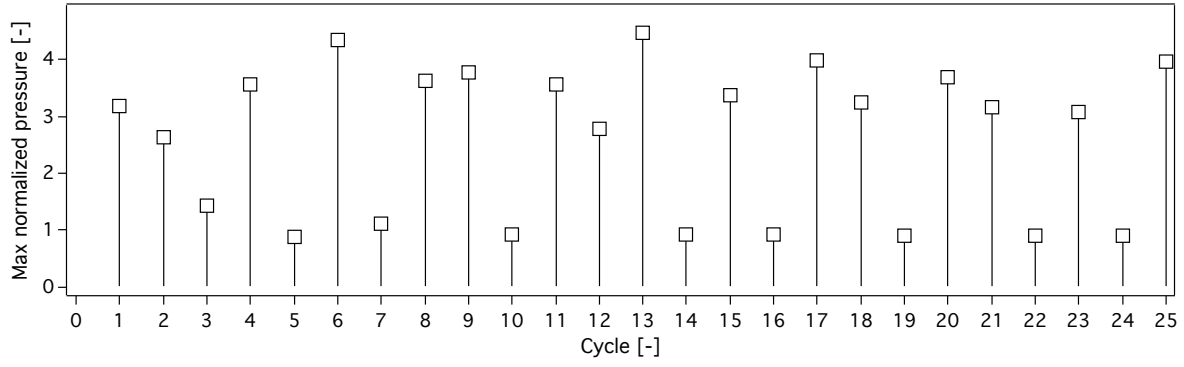


FIGURE 6.21 : OP2 - Maximum normalized pressure (P_{cc}^{max}/P_{air}) for each LES cycle.

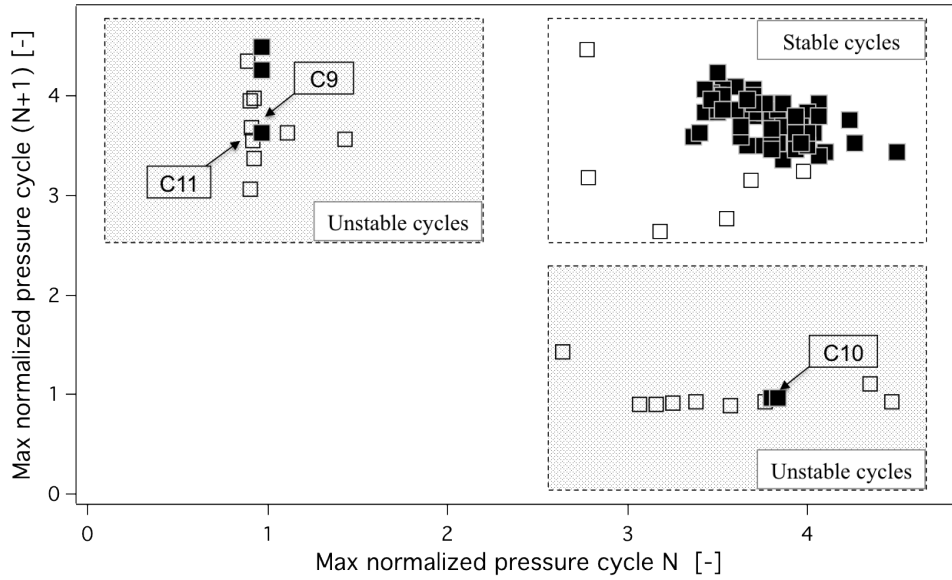


FIGURE 6.22 : OP2 - Maximum normalized pressure (P_{cc}^{max}/P_{air}) reached for cycle (N+1) versus maximum pressure for cycle N. ($\square$) LES results. ($\blacksquare$) Experimental results.

Influence of residuals

The previous results show that the turbulent fluctuations at the spark location control the combustion of cycle N and therefore the efficiency of cycle (N+1) : for example, a low velocity at the spark (cycle C9) leads to intense combustion and a slow following cycle (C10, Figs. 6.18 and 6.19). This instability mechanism is not observed for all cycles as seen in Fig. 6.22 but it controls more than half of them. This section suggests that the amount of residuals left after each cycle contributes to the oscillation between consecutive cycles.

The effect of residuals was investigated by studying scatterplots of the maximum pressure in the chamber versus the percentage (mass fraction) of burned gases left in the chamber at spark timing ($\theta = 125^\circ$). This quantity measures the residual gases left in the chamber after the exhaust and intake phases. Figure 6.23 shows that the lowest residual mass fractions at spark timing lead to the highest maximum pressure. Moreover, if cycle N burns efficiently, it leads to a high maximum pressure but also to complete combustion and therefore to a high level of residuals when the following cycle begins (Fig. 6.24).

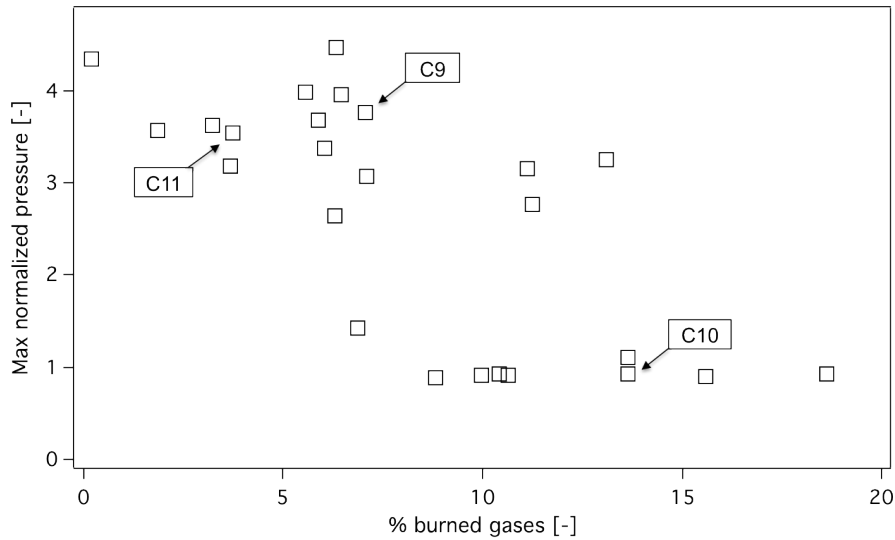


FIGURE 6.23 : OP2 - Maximum normalized pressure (P_{cc}^{max}/P_{air}) versus percentage of residual burned gases in the chamber.

Figure 6.25 shows the same analysis where the global residual mass fraction is replaced by the local residual mass fraction averaged over a sphere of 1cm radius around the spark location. The same trend is observed : cycles which begin with a high level of residuals, either near the spark (Fig. 6.25) or globally in the chamber (Fig. 6.23), lead to lower maximum pressures.

At this point, it is difficult to separate the effects of the velocity at spark location (Fig. 6.16) and of the residual mass fraction (Fig. 6.25). A high velocity at the spark or a high residual mass fraction at the beginning of a cycle both lead to a low maximum pressure. To clarify this point, another operating point (OP3) is computed in the next section at a higher rotation speed (1500 rpm instead of 1200).

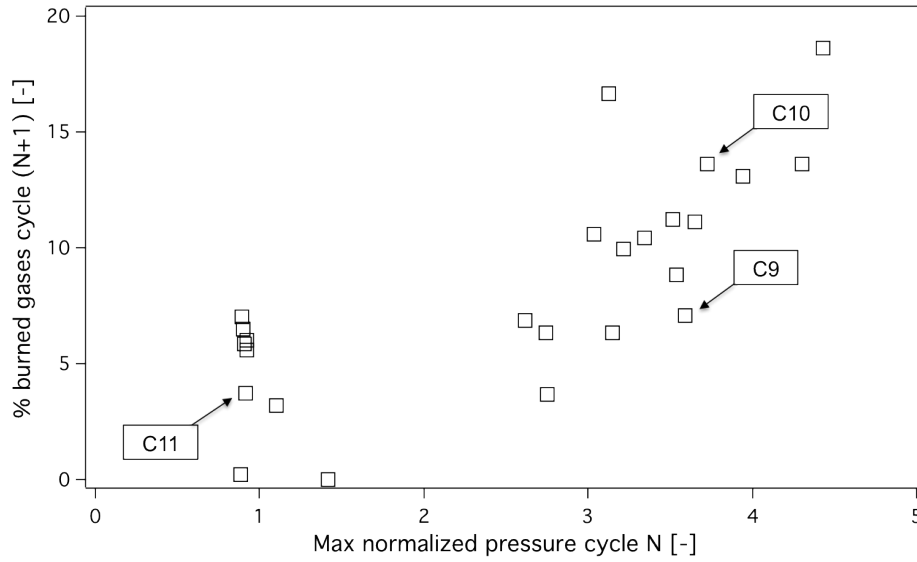


FIGURE 6.24 : OP2 - Percentage of residual burned gases in the chamber for cycle (N+1) versus maximum normalized pressure (P_{cc}^{max}/P_{air}) for cycle N. Exemple : the C9 point coordinates are (maximum pressure of cycle C8, percentage of burned gases of cycle C9).

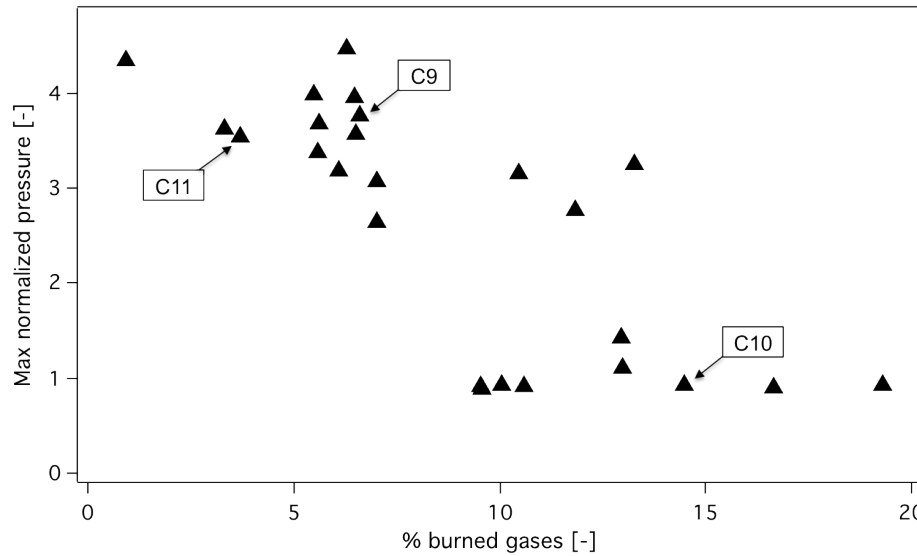


FIGURE 6.25 : OP2 - Maximum normalized pressure (P_{cc}^{max}/P_{air}) versus percentage of residual burned gases at spark location (averaged over a sphere of 1cm radius).

Calcul du rendement et imbrûlés

La Fig. 6.26 montre que la fraction massique de carburant restant dans la chambre à chaque fin de phase de combustion ($\theta = 175$ deg) varie en fonction de la pression maximale atteinte. 25 cycles sont représentés. Même avec des cycles qui brûlent, on constate que la phase de combustion autorisée par les cames est trop courte : la combustion est incomplète et 10 à 40% du carburant est éjecté quand l'échappement s'ouvre. Nous n'avons pas évalué de rendement car il varie pour chaque cycle. Mais il est clair que le fait que la pression n'atteint pas la valeur espérée est lié à une combustion incomplète.

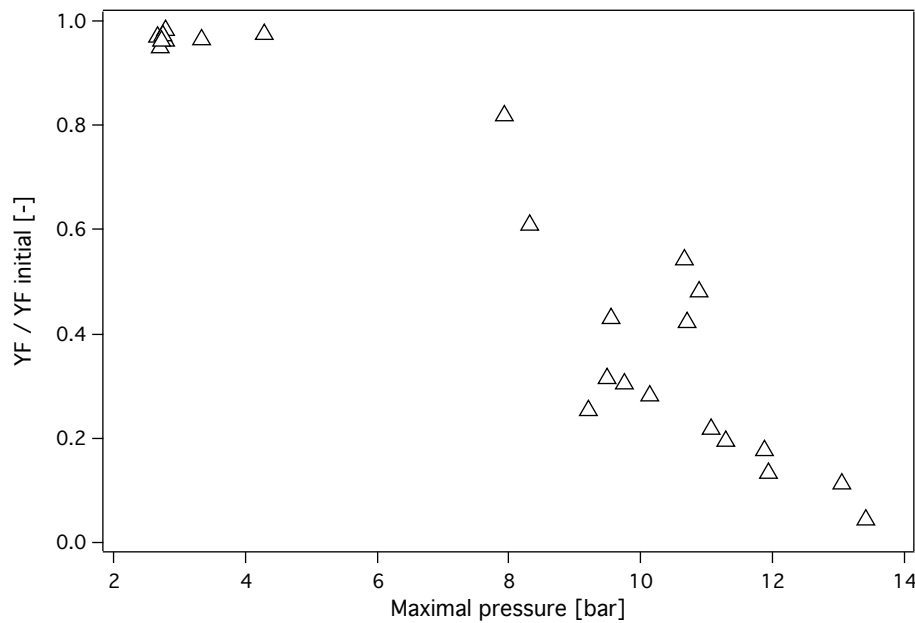


FIGURE 6.26 : OP2 : Résultats LES. Fraction massique moyenne de carburant dans la chambre à l'ouverture des cames d'échappement (Y_F) en fonction de la pression maximale atteinte au cours du cycle. Y_F est normalisée par la fraction massique de carburant dans la chambre au moment de l'allumage ($Y_{F, initial}$).

6.4.2 Carburation

La section précédente a montré que les cycles qui brûlaient mal étaient associés à des fractions massiques résiduelles de carburant importantes. Dans cette section, on s'intéresse à la stratification du carburant dans la chambre pour voir si cette stratification peut expliquer des combustions trop lentes ou trop différentes de cycle à cycle. Ceci est fait sur les cycles C9 à C11 de la Fig. 6.18.

Les pdfs de richesse juste avant allumage ($\theta = 125$ deg) sont tracées pour tous les points de la chambre de combustion sur la Fig. 6.27 pour les 3 cycles C9 (combustion forte), C10 (combustion trop lente) et C11 (combustion moyenne).

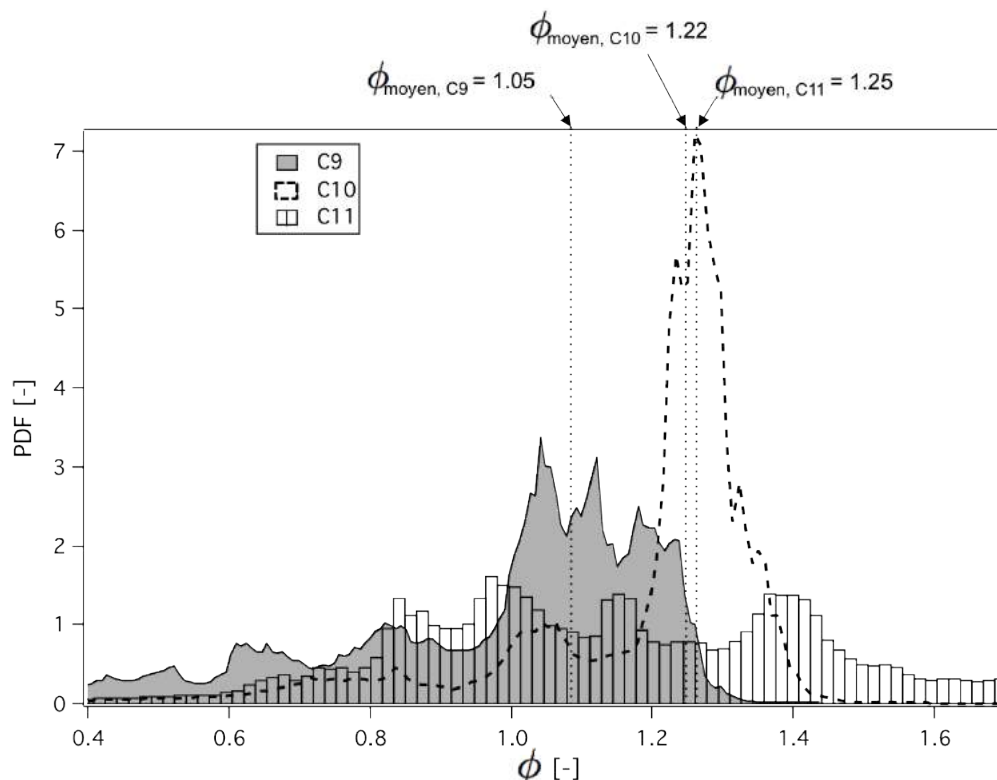


FIGURE 6.27 : OP2 : Résultats LES. Fonction de densité de probabilité (PDF) de richesse dans la chambre de combustion (ϕ) à l'instant d'allumage ($\theta = 125\text{deg}$) pour les cycles C9, C10 et C11.

On constate plusieurs points importants :

- Tout d'abord, d'un point de vue modélisation, la richesse dans la chambre varie localement de 0.4 à 1.6, ce qui est dans la gamme des richesses correctement prises en compte par le schéma cinétique C8H18/air décrit à la Sec. 6.2. Cette vérification a posteriori valide le choix fait pour la description de la chimie dans cette configuration.
- Les richesses moyennes observées dans la chambre pour C9, C10 et C11 sont 1.05, 1.22 et 1.25. La richesse théorique moyenne pour ce régime est de 1.2. La variabilité de ces richesses confirme que la carburation de la chambre, elle aussi, exhibe de fortes variations cycliques. Ces variations sont la conséquence directe d'une combustion incomplète et de cycles de vidange différents qui font que la quantité effective de carburant présent dans la chambre à l'allumage diffère de façon beaucoup trop importante pour une utilisation stable.
- La stratification du cas C10 (qui ne brûle quasiment pas) est très faible avec une pdf presque centrée sur la valeur moyenne. Ceci est dû à la forte turbulence observée pour ce cycle. Ce mélange n'est pas la cause de la combustion lente pendant C10 qui est due avant tout à la trop forte vitesse au niveau de la bougie.
- La stratification de C9 est plus forte que celle de C10 avec plusieurs pics, en particulier

du côté pauvre. C11 présente également une très grande stratification avec des richesses allant de 0.6 à plus de 1.5. Ces zones trop riches ($\phi > 1.2$) observées sur C11 sont dues au carburant accumulé suite à la combustion incomplète de C10. Cette accumulation ne se fait pas uniquement au niveau de la chambre de la combustion mais a lieu aussi dans la chambre de carburation et pendant la phase de vidange qui se fait de façon moins efficace à la fin de C10 car la pression dans la chambre est basse pour ce cycle qui brûle peu.

6.4.3 Moyennes de phase

La Fig. 6.21 résume les cycles LES calculés pour le point de fonctionnement OP2. On peut séparer ces 25 cycles en deux catégories : ceux qui brûlent et ceux qui brûlent moins bien (la pression maximale normalisée P_{cc}^{max}/P_{air} pour ces cycles ne dépasse pas 1). Des moyennes de phase sont réalisées sur chaque groupe de cycles afin de pouvoir comparer les champs de vitesse et de richesse au cours du cycle. Nous présentons ici les résultats obtenus aux mêmes instants qu'à la Sec. 5.2.1) :

- $\theta=127$ deg : juste après l'allumage (cames d'admission et d'échappement fermées),
- $\theta=168$ deg : pendant la phase combustion (volume constant),
- $\theta=17$ deg : au début de l'échappement (ouverture des cames d'échappement),
- $\theta=46$ deg : juste avant l'ouverture des cames d'admission
- $\theta=82$ deg : pendant la phase d'admission (cames d'admission et d'échappement ouvertes),
- $\theta=110$ deg : en fin de phase d'admission.

Comme nous savons que certains cycles brûlent bien et pas d'autres, il est utile de séparer les opérations de moyenne en deux classes. Ces classes sont facilement identifiables sur la Fig. 6.20 par exemple. Les points menant à une pression élevée font partie des cycles réussis. Ceux qui mènent à une pression faible brûlent mal. On les moyenne séparément.

Les Figs. 6.28 et 6.29 montrent donc les champs de vitesse axiale obtenus respectivement pour les cycles qui brûlent et ceux qui brûlent moins bien. Ces figures montrent un manque d'échantillonnage qui se traduit par un écoulement non symétrique mais ils sont cependant exploitables. Par exemple, à l'instant d'allumage ($\theta=127$ deg), les vitesses dans la chambre de combustion sont plus élevées pour les cycles qui ne brûlent pas bien, ce qui a pour effet de retarder la propagation de la flamme. Comme vu à la Sec. 6.4.1, le noyau de flamme est convecté dans la chambre et des vitesses excessives peuvent entraîner l'extinction de la flamme.

Les Figs. 6.30 et 6.31 illustrent les champs de richesse obtenus respectivement pour les cycles qui brûlent et ceux qui brûlent moins bien.

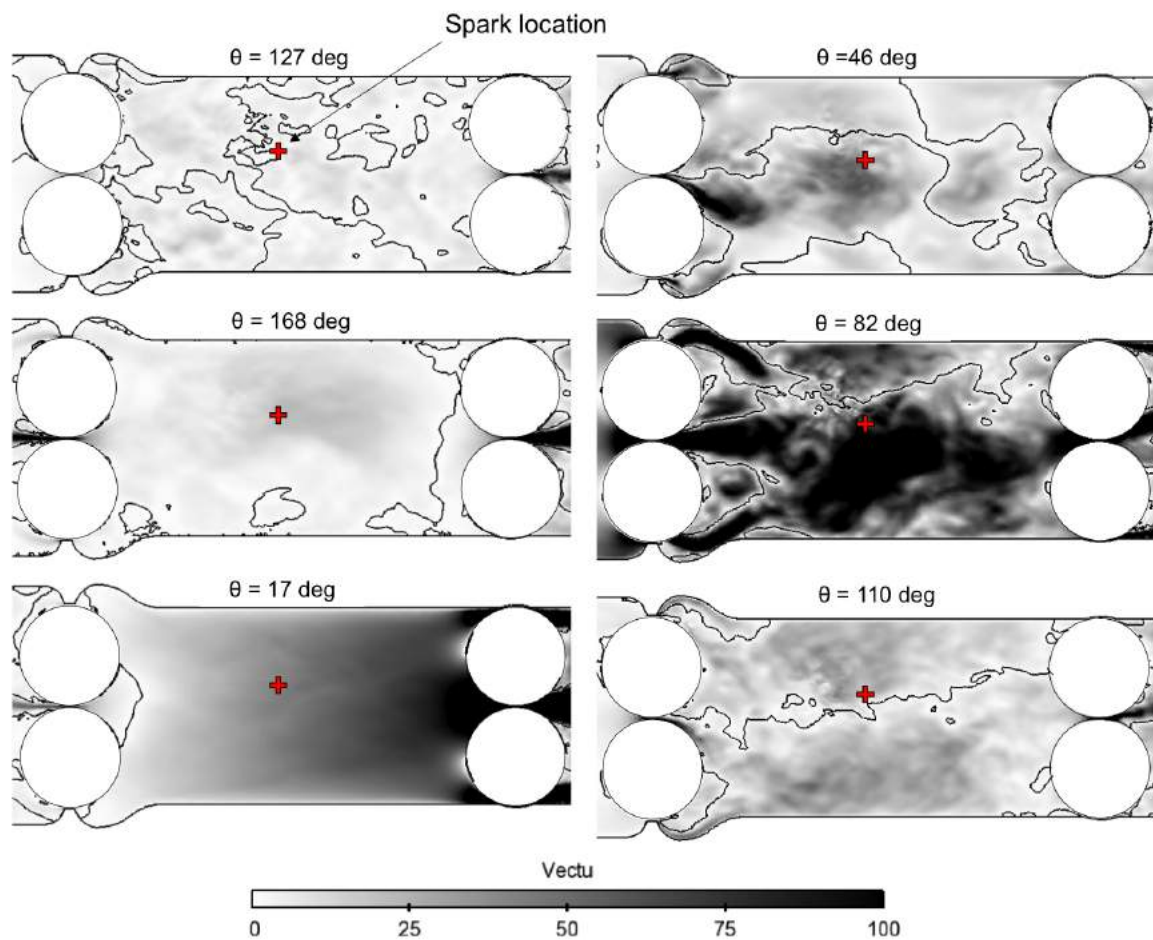


FIGURE 6.28 : Moyennes de phase des cycles qui brûlent (17 cycles) : isocontour de vitesse axiale ($u = 0 \text{ m/s}$) superposé au champ de $|u|$ (0 à 100 m/s) à 6 instants du cycle : $\theta = 127 \text{ deg}$, $\theta = 168 \text{ deg}$, $\theta = 17 \text{ deg}$, $\theta = 46 \text{ deg}$, $\theta = 82 \text{ deg}$ et $\theta = 110 \text{ deg}$.

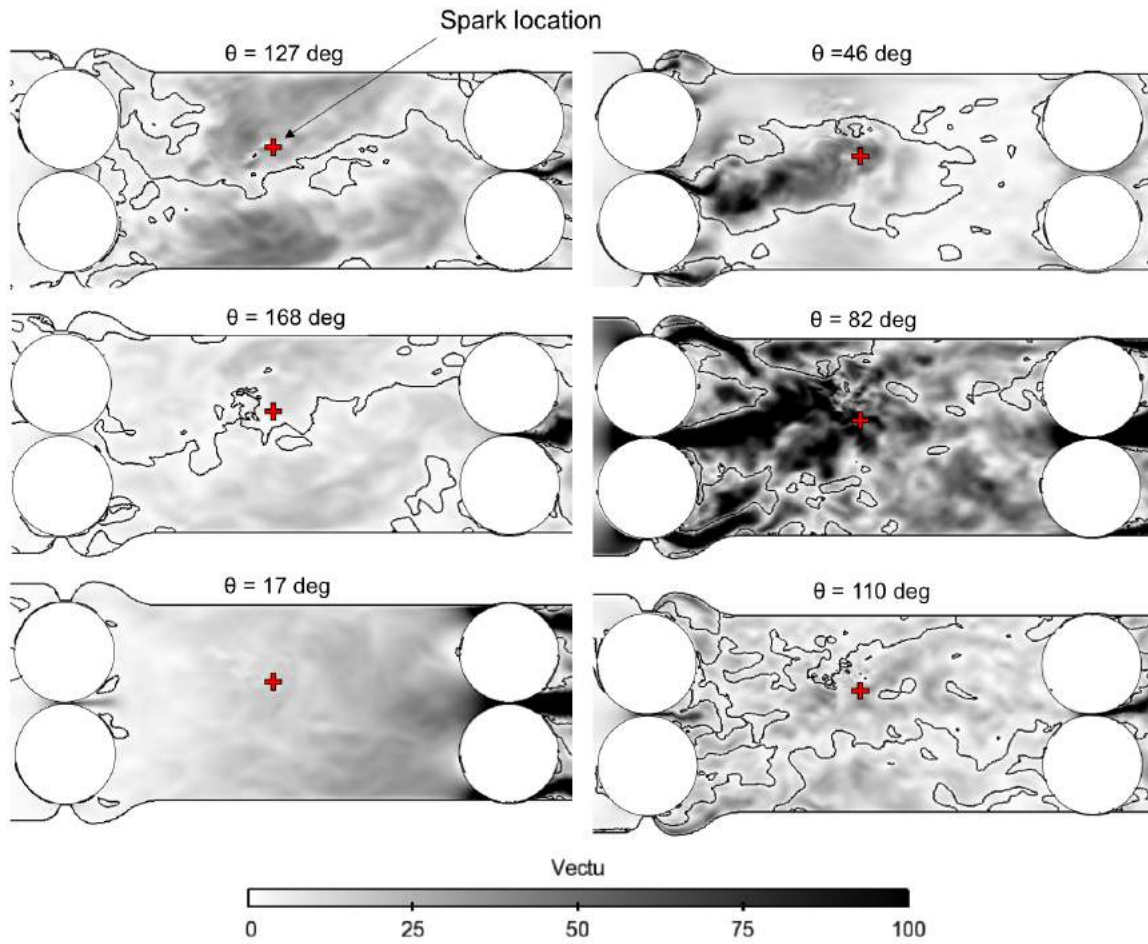


FIGURE 6.29 : Moyennes de phase des cycles qui brûlent moins bien (8 cycles) : isocontour de vitesse axiale ($u = 0$ m/s) superposé au champ de $|u|$ (0 à 100 m/s) à 6 instants du cycle : $\theta=127$ deg, $\theta=168$ deg, $\theta=17$ deg, $\theta=46$ deg, $\theta=82$ deg et $\theta=110$ deg.

Pour les cycles qui brûlent correctement (Fig. 6.30), l'écoulement est stratifié avant l'allumage à $\theta = 127\text{deg}$. Les gaz les plus riches sont localisés près de la sortie. Ceci n'est pas observé pour les cycles qui ne brûlent pas (Fig. 6.31) ce qui confirme les observations faites pour les pdfs des cycles C9, C10 et C11 : les cycles "bien mélangés" brûlent moins bien.

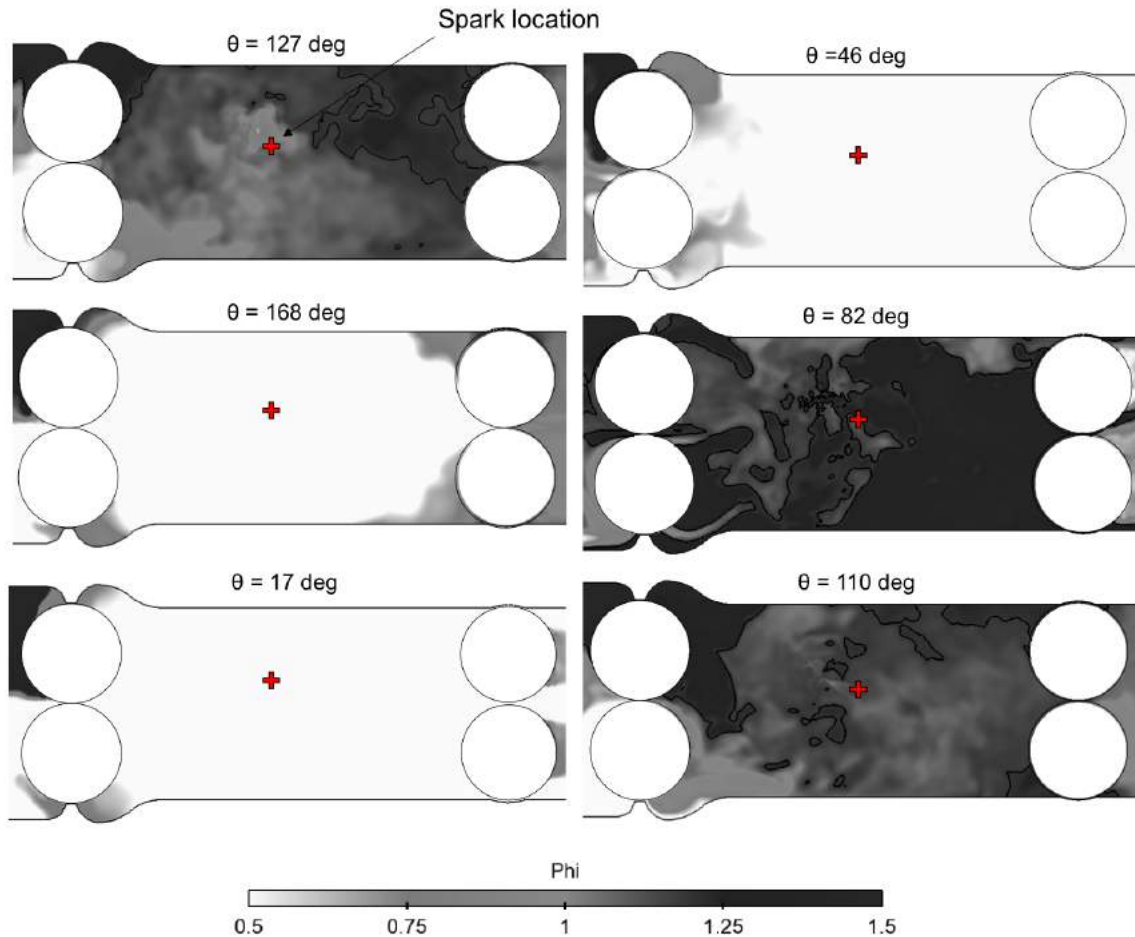


FIGURE 6.30 : Moyennes de phase des cycles qui brûlent : champ de richesse ϕ (0.5 à 1) à 6 instants du cycle : $\theta=127\text{deg}$, $\theta=168\text{deg}$, $\theta= 17\text{deg}$, $\theta=46\text{deg}$, $\theta =82\text{deg}$ et $\theta=110\text{deg}$.

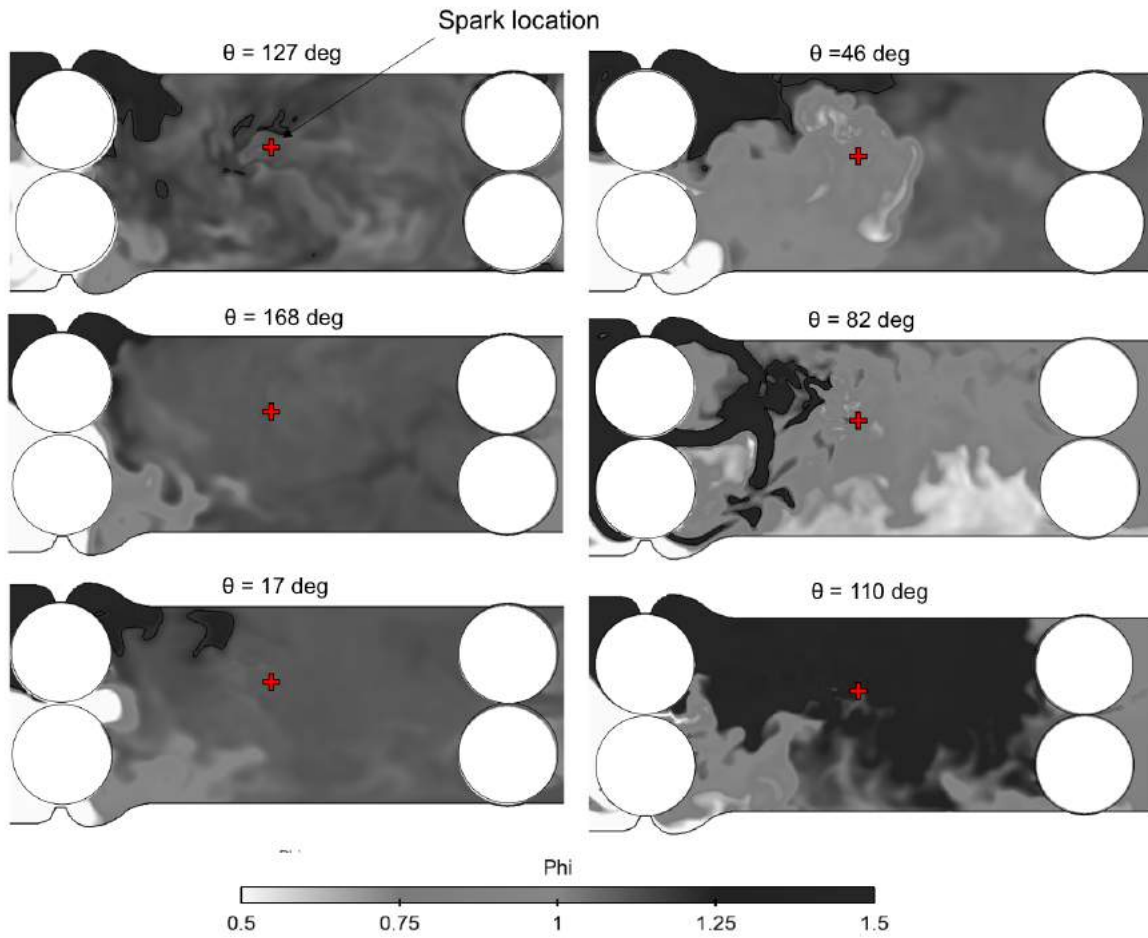


FIGURE 6.31 : Moyennes de phase des cycles qui brûlent moins bien : champ de richesse ϕ (0.5 à 1) à 6 instants du cycle : $\theta=127\text{deg}$, $\theta=168\text{deg}$, $\theta= 17\text{deg}$, $\theta=46\text{deg}$, $\theta=82\text{deg}$ et $\theta=110\text{deg}$.

6.4.4 Analysis of reacting CVC point OP3 (1500 rpm)

The previous section has shown that both turbulent velocity fluctuations and residuals played a role on cyclic fluctuations. To distinguish between these two mechanisms, a second point was studied where the rotation speed was set to 1500 rpm to increase velocities. Except for the rotation speed, the reacting point OP3 corresponds to the same conditions as OP2 (Tables 5.3 and 6.3).

As expected, the larger rotation speed of OP3 leads to larger velocities at the spark and in the chamber (Fig. 6.32) compared to OP2 (Fig. 6.15). This has a direct impact on combustion for OP3 : experiments show a high level of misfires and nearly 50% of the cycles do not burn (Fig. 6.33). LES reveals an almost similar behavior (Fig. 6.34) where 60% of the cycles do not burn.

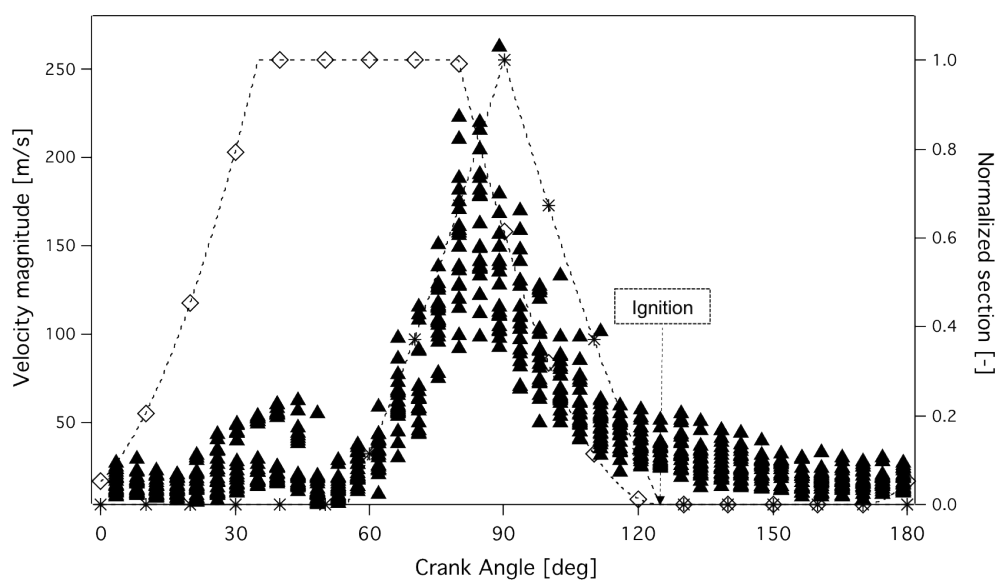


FIGURE 6.32 : OP3 - (▲) Evolution of the velocity magnitude at the spark location (averaged over a sphere of 1cm radius) versus cycle angle. (*) Intake section. (◇) Exhaust section.

The analysis of pressure maxima in LES and experimental data shows that one successful cycle N almost always leads to a misfire for cycle (N+1) (Fig. 6.35). Moreover, a second class of stable cycles appear : stable cycles for OP3 correspond to consecutive misfires showing that multiple misfires can occur successively as observed in Fig. 6.33 (for the experiment) or in Fig. 6.34 (for the LES). For this case, the scenario of instability is simpler than for OP2 :

- a successful N cycle leads in all cases to a high turbulent velocity at the spark for cycle (N+1) (Fig. 6.36).
- a cycle (N+1) with a large velocity (> 33 m/s) at spark timing never burns (Fig. 6.37). This result is observed in LES as well as in experimental data. Experimental measurements of velocity at spark location confirm that the misfire probability (50% experimentally) is

linked to a high velocity level (29 m/s). This critical velocity observed experimentally is the same order of the velocity threshold (33 m/s) evidenced by LES for OP3.

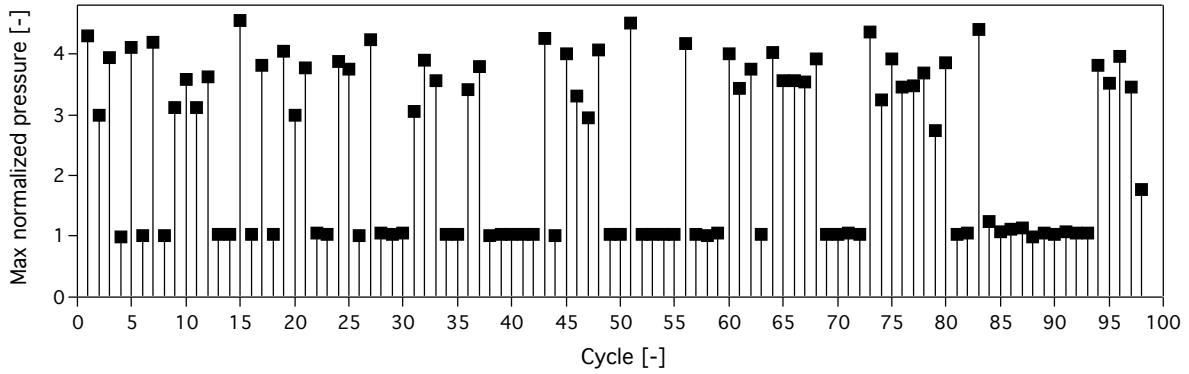


FIGURE 6.33 : OP3 - Maximum pressure for consecutive experimental cycles.

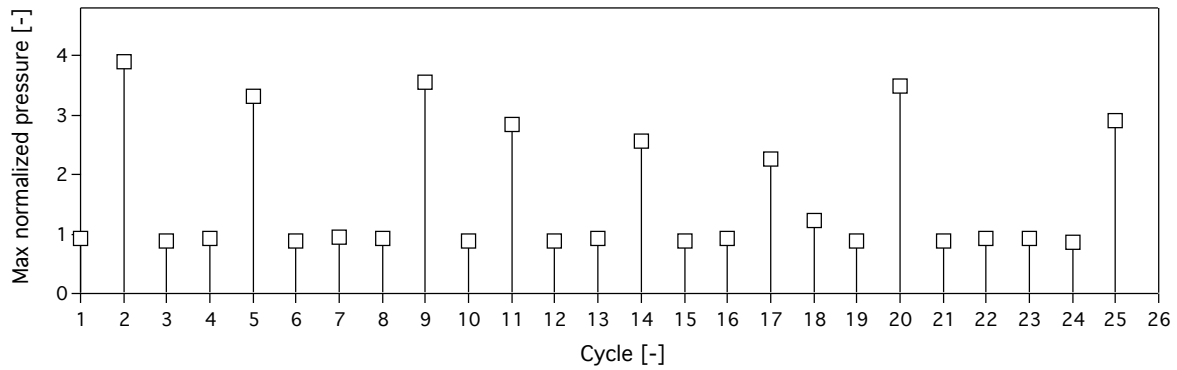


FIGURE 6.34 : OP3 - Maximum pressure for consecutive LES cycles.

This scenario explains why a cycle N with strong combustion leads to a misfire of cycle (N+1). Vice versa, cycles which do not burn lead to a decay of the velocity in the chamber and at the spark (Fig. 6.36) so that combustion can eventually be successful again. Figure 6.37 displays the evolution of the maximum normalized pressure versus the velocity magnitude at the spark or in the whole chamber (the same trend is observed for both quantities) : when the velocity at the spark is more than 33 m/s, the cycle systematically leads to a misfire.

This result can be corroborated by studies of ignition in a constant velocity flow [46] or in a turbulent flow [45] showing that for a given equivalence ratio and a given ignitor, ignition fails when the flow velocity (normalized by the flame speed) at the spark exceeds a certain threshold. Here, despite the large ignition energies used experimentally, the velocities at the spark are high enough to lead to misfires. No attempt was made to correlate the critical velocities (u/s_L) needed for misfires to the spark energy because the spark was the same for almost all cases, but this would be the next work direction.

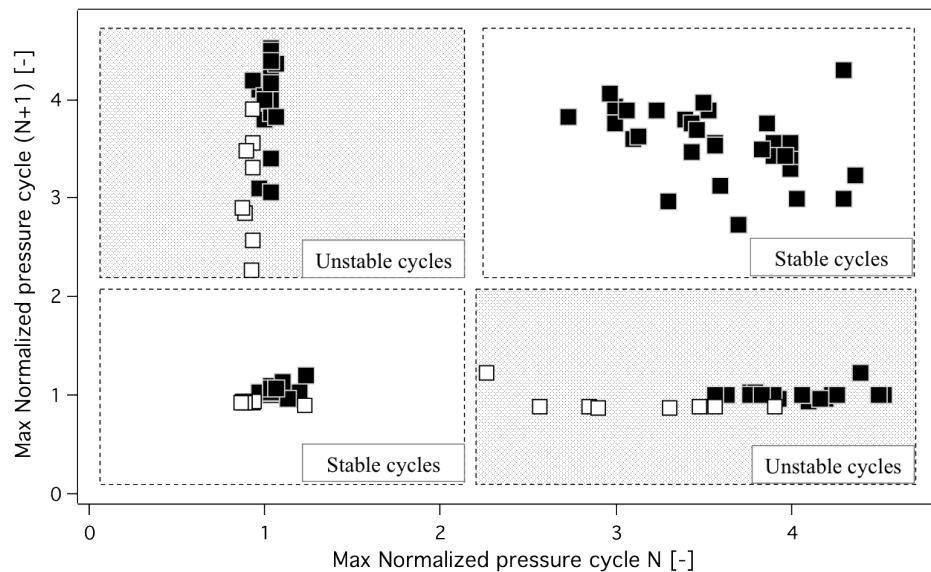


FIGURE 6.35 : OP3 - Maximum pressure for cycle (N+1) versus maximum pressure for cycle N. (□) LES results. (■) Experimental results.

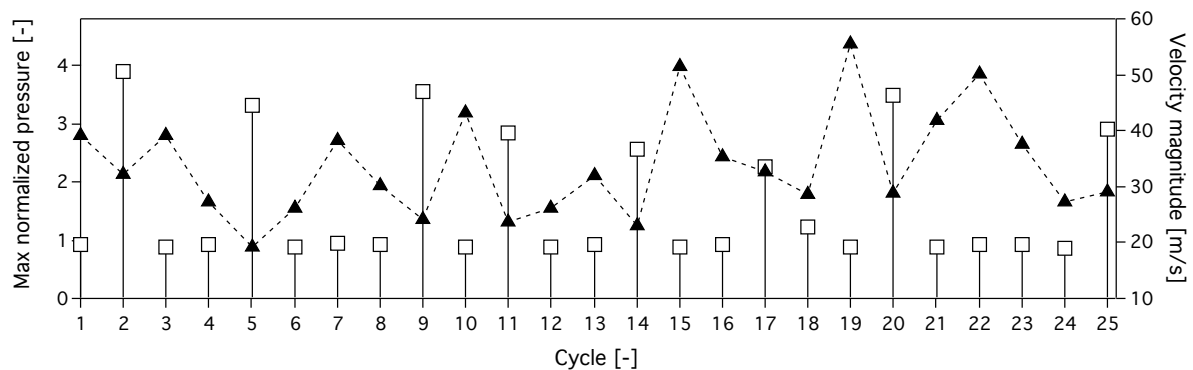


FIGURE 6.36 : OP3 - Influence of cycle N on the velocity magnitude of cycle (N+1). (□) Maximum pressure for each LES cycle. (▲) LES magnitude of the velocity at spark timing at the plug (averaged over a sphere of 1cm radius).

When the velocity at the spark is larger than the critical value observed for this case (33 m/s), most ignition sequences follow the scenario visualized in Fig. 6.38 : the initial flame kernel is formed by the spark (Fig. 6.38a), it begins to propagate (Fig. 6.38b) but it is rapidly diffused (Fig. 6.38c) so that the flame propagation is totally stopped (Fig. 6.38d). Ignition takes place but it creates a kernel which is too weak to propagate in the turbulent flow.

As a reference, Fig. 6.39 presents a case where the velocity at the spark is less than 30 m/s and the flame develops normally.

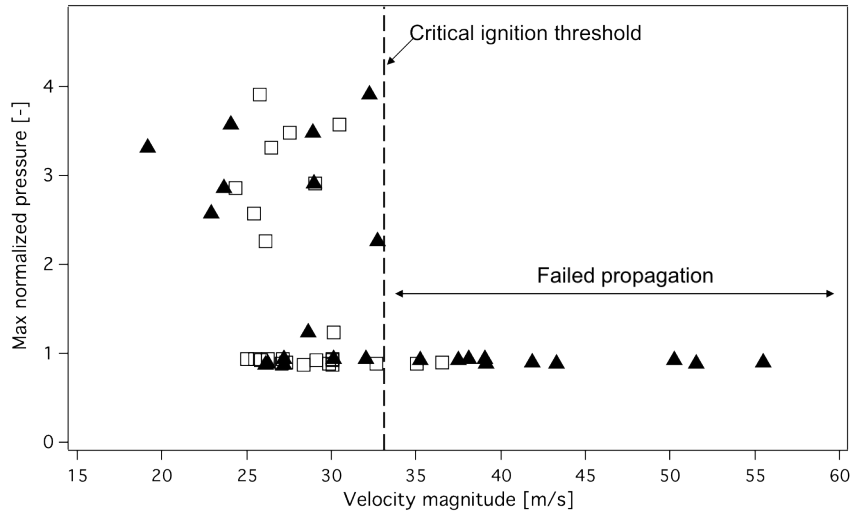


FIGURE 6.37 : OP3 - Maximum pressure versus LES velocity magnitude. (▲) LES magnitude of the velocity at the spark location (averaged over a sphere of 1cm radius). (□) LES magnitude of the velocity averaged over the chamber.

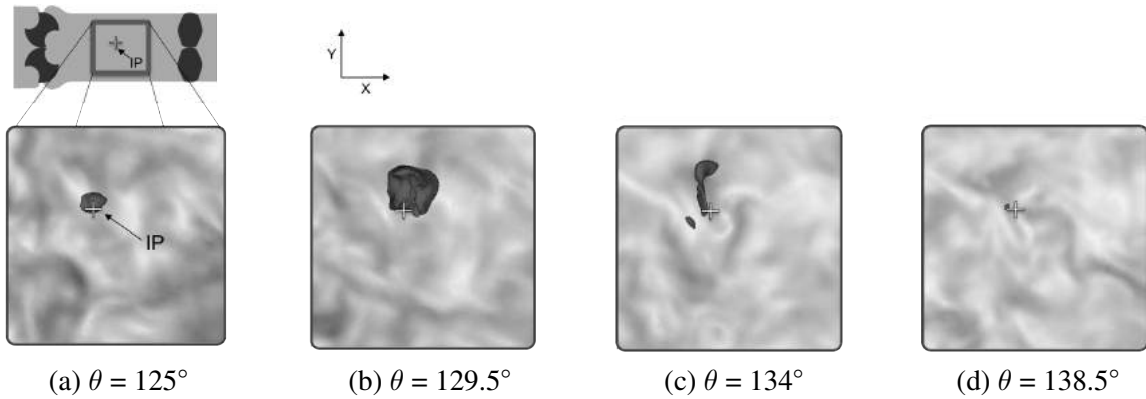


FIGURE 6.38 : OP3 - LES results : flame position (isosurface of temperature : $T = 1800K$) superimposed to the field of axial velocity (velocity magnitude from 0 to 100 m/s) 1mm in front of the chamber wall. IP indicates the point where the spark is produced.

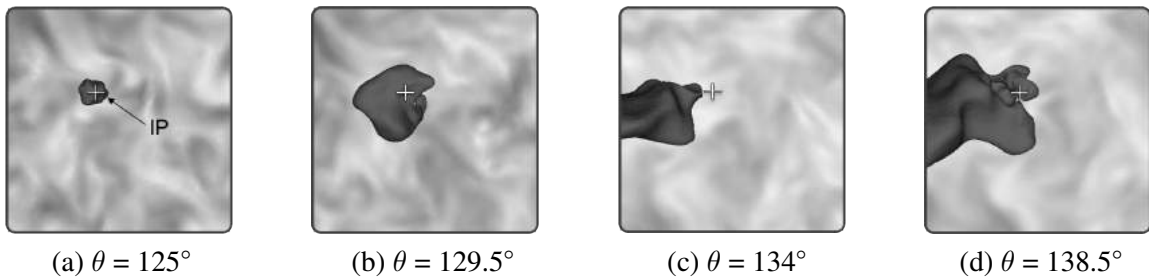


FIGURE 6.39 : OP3 - LES results : flame position (isolevel of temperature : $T = 1800K$) superimposed to the field of axial velocity (velocity magnitude from 0 to 100 m/s). IP indicates the point where the spark is produced.

6.5 Comparaison CVC0D avec résultats expérimentaux et LES sur un cas réactif : OP2

Les résultats obtenus avec l'outil CVC0D sont comparés ici aux données expérimentales ainsi qu'aux résultats LES, pour le point de fonctionnement OP2. Les pressions sont toujours normalisées par la pression dans le réservoir amont, P_{air} , et les sections d'admission et d'échappement par leurs valeurs maximales.

La Fig. 6.41 présente la courbe de pression obtenue avec CVC0D pour OP2, 25 cycles consécutifs obtenus par la LES, ainsi que l'enveloppe de pressions expérimentales.

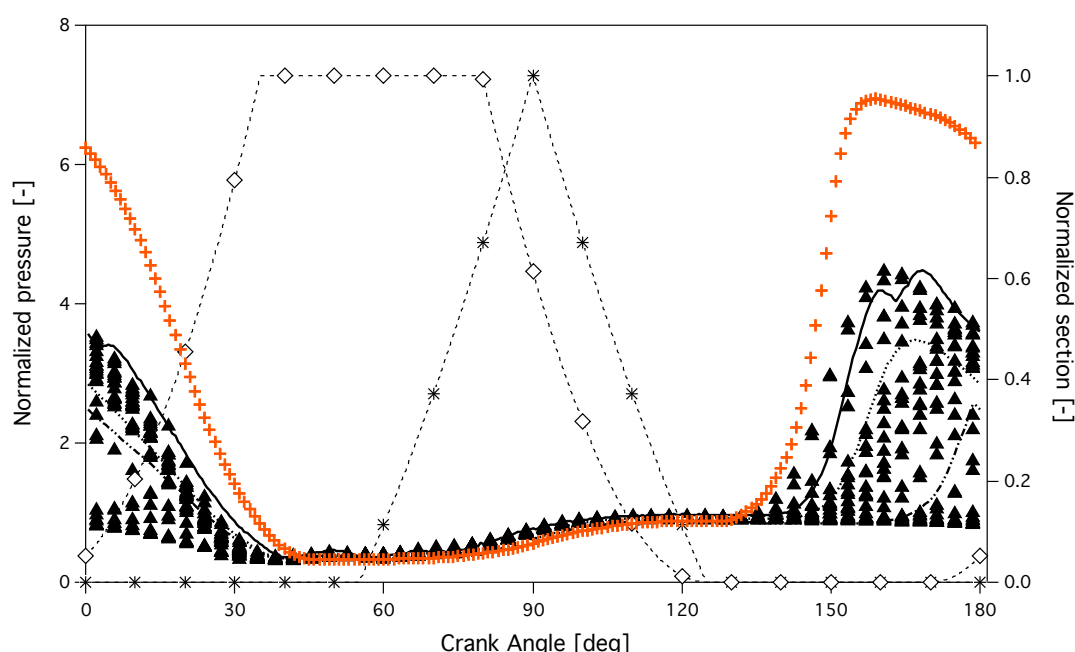


FIGURE 6.40 : OP2 : comparaison des cycles obtenus expérimentalement, par la LES et avec CVC0D - Evolution temporelle de la pression dans la chambre de combustion au cours du cycle. (+) Pression CVC0D $\phi = 1.2$. (—) Pression expérimentale maximale. (- - -) Pression expérimentale minimale. (.....) Pression expérimentale moyenne. (▲) Pression 25 cycles consécutifs LES. (*) Section d'admission. (◇) Section d'échappement.

La pression maximale normalisée atteinte dans CVC0D est supérieure à celles obtenues expérimentalement : 7 contre 3.5 si on prend la pression moyenne normalisée expérimentale. Il y a plusieurs raisons possibles à cette différence de pression entre modèle 0D et expérience :

- Dans CVC360, toute la charge dans la chambre est brûlée pendant la phase de volume constant. Il est sûrement nécessaire de corriger le problème est de savoir quelle fraction de carburant brûle vraiment. Expérimentalement, on ne connaît pas la masse de carburant restante en fin de combustion. La LES peut fournir un ordre de grandeur pour cette masse.
- Une deuxième hypothèse concerne le flux thermique aux parois modélisé dans CVC360. Si ce flux thermique est trop faible comparé à l'expérience, la pression finale obtenue avec

CVC0D sera trop élevée.

- Enfin, une autre inconnue dans cette comparaison est la richesse dans la chambre au moment de l'allumage. Dans CVC0D, on fait l'hypothèse que les gaz frais admis dans la chambre sont parfaitement prémélangés et sous forme gazeuse. On fixe alors une richesse égale à la richesse visée au cours des essais expérimentaux pour ce point de fonctionnement $\phi = 1.2$. Expérimentalement, le carburant est injecté sous forme liquide mais il n'y a pas de données expérimentales sur la richesse réelle du mélange au moment de l'allumage.

La comparaison des résultats de CVC0D et de la LES, qui présentent initialement une même richesse $\phi = 1.2$, montre que deux mécanismes ont été insuffisamment modélisés dans CVC0D :

- les pertes thermiques modélisées par la corrélation Eq. 3.42 sont trop faibles dans CVC0D. On a donc introduit un facteur correctif, déterminé à partir de la LES qui modifie le coefficient h de convection. h est multiplié par un facteur α_{LES} estimé à $\alpha_{LES} = 5$. Cette valeur a été identifiée par quelques tests préliminaires et est dans la gamme raisonnable d'augmentation des transferts thermiques entre un tube lisse stationnaire (utilisé pour le modèle de la Sec. 3.8) et une chambre réelle, de géométrie complexe, en régime pulsé.
- les fuites de carburant et la combustion incomplète lors de la phase de combustion constituent le second problème. L'analyse des champs LES (Fig. 6.26) montre qu'entre 20 et 40 % de carburant ne brûle pas pendant la phase de combustion à volume constant. Ceci peut être pris en compte dans CVC0D en modifiant la fraction massique de carburant disponible au début de la combustion. $Y_F^{CVC0D} = Y_F^* \beta_{LES}$ où β_{LES} vaut 0.6.

Avec ce choix de paramètres ($\alpha_{LES} = 5$ et $\beta_{LES} = 0.6$), la Fig. 6.41 montre que le modèle CVC0D peut être utilisé pour prédire les courbes de pression du thermoréacteur mais pas de façon indépendante. La modélisation des pertes thermiques ainsi que les imbrûlés nécessitent le recours au code LES.

Enfin, on remarque que la combustion dans CVC0D démarre plus tôt que dans l'expérience ou dans la LES. L'allumage a lieu à $\theta = 125$ deg, au moment où les comes amont et aval se ferment. Les résultats LES ont montré que les vitesses résiduelles au niveau du point d'allumage à cet instant sont grandes. Un cycle peut ainsi s'éteindre si la vitesse localement au point d'allumage dépasse une valeur critique. Le noyau de flamme peut être convecté dans la chambre avant que la flamme puisse réellement se propager, ce qui retarde la combustion et la montée en pression des gaz dans la chambre.

En conclusion, il est clair qu'un code 0D comme CVC0D peut être utilisé pour prévoir la combustion dans le thermoréacteur, mais ses performances s'amélioreront quand les chambres CVC auront un fonctionnement plus classique (pas de variabilité cyclique, pas d'imbrûlés) et donc plus facilement modélisable. A ce stade, la LES est la méthode à employer en premier en liaison avec les résultats expérimentaux. Les informations fournies par la LES servent à améliorer le fonctionnement du CVC mais aussi les modèles 0D comme CVC0D. Dans le monde des moteurs à piston, la construction de codes 0D est le fruit de dizaines d'années d'expérience sur d'innombrables moteurs et elle fait appel à de très nombreux sous modèles (pour les transferts

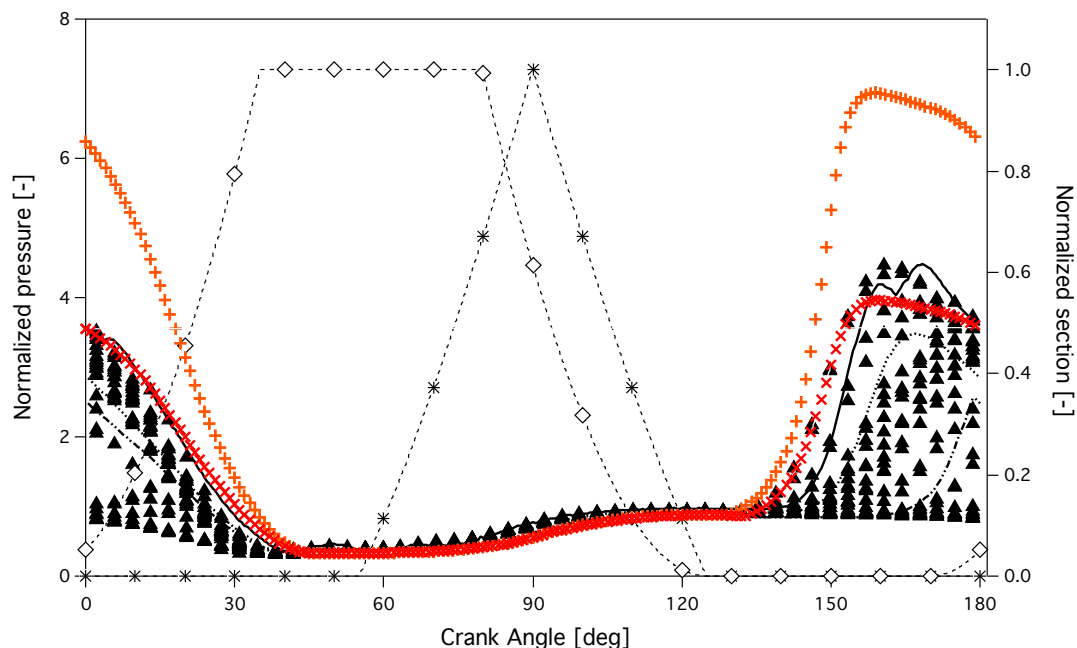


FIGURE 6.41 : OP2 : comparaison des cycles à froid obtenus expérimentalement et avec CVC0D. - Evolution temporelle de la pression dans la chambre de combustion au cours du cycle. (+) Pression CVC0D $\phi = 1.2$. (x) Pression CVC0D $\phi = 0.7$. (—) Pression expérimentale maximale. (- - -) Pression expérimentale minimale. (.....) Pression expérimentale moyenne. (▲) Pression 25 cycles consécutifs LES. (*) Section d'admission. (◇) Section d'échappement.

thermiques par exemple) basés sur des paramétrisations ad-hoc et pas sur des arguments physiques. Pour parvenir à ce niveau, il va être nécessaire de faire le même effort pour les chambres CVC. Cet effort sera raccourci par l'emploi de la LES mais reste un défi significatif. Dans tous les cas, prévoir les instabilités cycliques restera hors de portée des codes OD.

Chapitre 7

Conclusion

Dans le monde des turbines à gaz, le passage d'un cycle où la combustion se fait à pression constante à un cycle où la combustion se ferait à volume constant (comme dans un moteur Diesel) constitue une des voies les plus prometteuses pour augmenter encore le rendement dans les vingt années à venir. Pour parvenir à une combustion à volume constant, une solution envisagée est le thermoréacteur étudié dans cette thèse. Le thermoréacteur fait partie d'une catégorie plus vaste de chambres de combustion équipées de valves à l'entrée et à la sortie afin d'assurer une combustion à volume constant. Ces chambres ne seront pas employées sur des vrais moteurs avant 2040 car elles posent de nombreux défis scientifiques complexes. Parmi ceux-ci, il faut vérifier que le gain théorique lié au passage à la combustion à volume constant, n'est pas perdu quand on doit implémenter ce cycle dans un véritable moteur où les problèmes technologiques peuvent mener à des pertes d'efficacité fortes. Parmi les pertes possibles, on retrouve des facteurs bien connus dans les moteurs à piston : fortes pertes thermiques, balayage et croisement de soupapes menant à des rendements dégradés, instabilités cycliques, problèmes d'injection du carburant liquide, flashbacks. Dans cette thèse, on ne s'est pas intéressés à d'autres problèmes plus technologiques mais tout aussi considérables comme la tenue thermique et mécanique des parois, les problèmes mécaniques liés à la mise en rotation, les fuites liées aux entrées et l'efficacité théorique de la combustion dans une chambre à volume constant.

Plutôt que d'étudier les chambres CVC en général, cette thèse a pris pour cas d'application, un concept de chambre CVC appelé le thermoréacteur. Le thermoréacteur est un concept qui a été conçu par la société COMAT, sur des brevets de M. Aguilar et testé au laboratoire Pprime, expérimentalement. Ce travail de thèse avait pour objectif de compléter ce travail en utilisant la simulation numérique. Deux outils numériques ont été développés au cours de cette thèse :

1/ Un outil zéro-dimensionnel appelé CVC0D a été développé entièrement pendant la thèse afin de prévoir l'efficacité de cycles de type CVC dans le thermoréacteur. Cet outil s'inspire directement des codes d'analyse moteur utilisés dans le monde automobile et a pour objectif de prévoir la pression au cours du temps dans un cycle CVC complet : admission, combustion, échappement (il n'y a pas de compression dans une chambre CVC). C'est une modélisation

simple, écrite à partir de bilans globaux sur le volume de la chambre de combustion. Cette modélisation implique de nombreuses hypothèses et l'utilisation de sous modèles et de paramètres qui ne peuvent être obtenus dans le code CVC0D et doivent être fournis au code soit à partir de mesures soit à partir d'autres simulations. Dans le cas présent, ce sont des simulations LES qui ont été obtenues pendant cette thèse pour paramétrer deux sous modèles importants dans CVC0D : (1) les coefficients de décharge des rideaux de valves du thermoréacteur pour calculer les débits entrant et sortant dans la chambre et (2) la décroissance de la vitesse moyenne dans la chambre quand les soupapes sont fermées qui est employée pour prévoir les pertes de chaleur et la vitesse de la flamme dans le régime turbulent. Dans le futur il serait possible d'utiliser plus d'informations issues de la LES pour alimenter le code CVC0D mais cela n'a pas été jugé nécessaire ici. On notera en particulier que seules des simulations LES sans combustion ont été exploitées pour alimenter le code CVC0D.

2/ En parallèle de CVC0D, cette thèse s'est appuyée sur des simulations haute fidélité, tri dimensionnelles de la géométrie complète de la chambre avec et sans combustion. Il s'agit de calculs massivement parallèles, effectués avec le code AVBP (CERFACS / IPFEN) pour la combustion iso-octane air dans la chambre du thermoréacteur. Ces simulations sont complémentaires de CVC0D. En effet, elles constituent une véritable expérience numérique parallèle qui permet d'investiguer des mécanismes hors de portée de CVC0D. L'élément essentiel qui a été abordé pendant cette thèse est l'existence de variations cycliques : les cycles observés dans le CVC expérimentalement à Poitiers comme dans la LES de cette thèse sont tous différents. Ils peuvent différer tellement que certains cycles brûlent et d'autres pas. Cette problématique est hors de portée d'outils comme CVC0D mais pose un problème qui doit être résolu avant toute autre question : il est indispensable de contrôler les variations cycliques afin de pouvoir utiliser ensuite un outil comme CVC0D qui ne sait pas gérer des cycles différents. De même, en pratique, il est indispensable de supprimer ces variations ou au minimum de les réduire à de faibles niveaux, si ce moteur doit être utilisé en pratique. La thèse a donc été centrée sur l'analyse des variations cycliques : la combinaison des outils LES et expérimentation a permis de montrer que ces variations cycliques sont en fait une instabilité entre cycles où un cycle efficace entraîne ensuite des vitesses très fortes pour le cycle suivant au point que ce cycle brûle mal. De même un cycle qui brûle mal génère des vitesses faibles lors de l'injection suivante, et donc une combustion qui se développe plus facilement dans le cycle qui suit. Expérimentalement comme numériquement, on observe que ce sont des vitesses de l'ordre de 30 m/s au niveau de la bougie qui mènent à des extinctions ou des combustions incomplètes. Il s'agit là d'une spécificité des chambres CVC : dans un moteur à piston normal, la phase de compression permet au champ de vitesse de baisser et d'éviter de trop fortes vitesses au niveau de la bougie (en général) au moment de l'allumage. Dans une chambre CVC, il n'y a pas de phase de compression : dès que les soupapes se ferment, il est nécessaire d'allumer rapidement pour avoir le temps de brûler toute la charge et à cet instant, la vitesse est forte dans la chambre. La LES permet d'étudier des cycles successifs, de corrélérer l'efficacité des cycles et d'analyser les mécanismes qui font que ces cycles diffèrent. On découvre ici un point qui va certainement être au centre du développement des chambres CVC dans le futur : il faudra assurer un allumage et le développement d'une flamme dans un écoulement très turbulent. Il s'agit d'un défi technologique et scientifique

considérable que cette thèse n’a pas abordé : les calculs LES effectués ici n’ont fait que confirmer que ce problème d’allumage et de propagation en combustion turbulente était la cause des variations cycliques. Mais, comme dans les moteurs à piston, la LES a démontré qu’elle était un outil de choix pour analyser ces mécanismes dans les futures chambres CVC.

Les perspectives de ce travail sont nombreuses : même si le thermoréacteur, dans sa version et ses régimes étudiés ici, semble avoir des soucis de variabilité cyclique, d’autres concepts sont en train d’apparaître et il faudra s’assurer que ces nouvelles chambres n’exhibent pas d’instabilité. Plutôt que de construire ces chambres, il sera plus facile de les tester en utilisant des outils LES. Ceci nécessitera cependant de s’assurer que la LES reste prédictive pour la combustion diphasique dans des écoulements à forte vitesse comme ceux rencontrés ici.

Enfin, une vraie turbine utilisant une chambre CVC devra voir fonctionner la turbine et le compresseur dans des régimes totalement instationnaires car pulsés. Ceci nécessitera des calculs couplés du moteur entier et pas de chaque élément isolé comme fait jusqu’à maintenant.

Bibliographie

- [1] T. E. HUTCHINS et M. MEGHALCHI : Energy and exergy analyses of the pulse detonation engine. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 125:1075–1080, 2003.
- [2] P. WOLANSKI : Detonative propulsion. *Proc. Combust. Inst.* , 34:125, 2013.
- [3] Bernhard C. BOBUSCH, Phillip BERNDT, Christian O. PASCHEREIT et Rupert KLEIN : Shockless explosion combustion : An innovative way of efficient constant volume combustion in gas turbines. *Combust. Sci. Tech.* , 186(10-11):1680–1689, 2014.
- [4] A. PUTNAM, F. BELLES et J. KENTFIELD : Pulse combustion. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 12:43, 1986.
- [5] X. J. GU, M. Z. HAQ, M. LAWES et R. WOOLLEY : Laminar burning velocity and markstein lengths of methane-air mixtures. *Combust. Flame* , 121:41–58, 2000.
- [6] H. B. DIXON : The rate of explosion in gases. *Philosophical Transactions Royal Society London A*, 184:97–188, 1893.
- [7] B. C. BOBUSCH : *Fluidic Devices for Realizing the Shockless Explosion Combustion Process*. Thèse de doctorat, Technischen Universitat Berlin, 2015.
- [8] P. Klotsch D. N. FREY et A. EGLI : The automotive free-piston-turbine engine. Rapport technique 570051, SAE, 1957.
- [9] J. KENTFIELD, A. REHMAN et J. CRONJE : Performance of pressure-gain combustors without moving parts. *J. Energy*, 4:56, 1980.
- [10] J. KENTFIELD et M. O’BLENES : Methods for achieving a combustion-driven pressure gain in gas turbines. *J. Eng. Gas Turb. and Power* , 110:704, 1988.
- [11] John H. S. LEE : *The Detonation Phenomenon*. Cambridge University Press, 2009.
- [12] M. BAPTISTA, A. RASHEED, B. BADDING, O. VELAGANDULA et AJ. DEAN : Mechanical response in a multi-tube pulsed detonation combustor-turbine hybrid system. In AIAA-2006-1234, éditeur : *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. AIAA, 2006.
- [13] A. RASHEED, A. FURMAN et AJ. DEAN : Wave attenuation and interactions in a pulsed detonation combustor-turbine hybrid system. In AIAA-2006–1235, éditeur : *44th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. AIAA, 2006.

-
- [14] M. R. NALIM : *Wave Cycle Design for Wave Rotor Engines with Limited Nitrogen Oxide Emissions*. Thèse de doctorat, Cornell University, Ithaca, NY, 1994.
- [15] M. R. NALIM : Preliminary assessment of combustion modes for internal combustion wave rotors. In AIAA-95-2801, éditeur : *31st AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, San Diego, California, USA, 1995.
- [16] P. AKBARI, R. NALIM et N. MUELLER : A review of wave rotor technology and its applications. *J. Eng. Gas Turb. and Power* , 128:717, 2006.
- [17] S. M. JONES et G. E. WELCH : Performance benefits for wave rotor-topped gas turbine engines. Rapport technique Technical Report ARL-TR-1065, Army Research Laboratory, 1996.
- [18] D. PAXSON, J. WILSON et G. WELCH : Comparison between simulated and experimentally measured performance of a four port wave rotor. In *43rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, 2007.
- [19] T. M. ELHARIS, S. D. WIJEYAKULASURIYA et M. R. NALIM : Wave rotor combustor aerothermodynamic design and model validation based on initial testing. In AIAA-2010-7041, éditeur : *ASME, SAE, and ASEE, Joint Propulsion Conference and Exhibit, 46th*, Nashville, Tennessee, USA, July 2010.
- [20] Y. MATSUTOMI, C. HEIN, C. LIAN, S. MEYER, C. MERKLE et S. HEINSTER : Facility development for testing of wave rotor combustion rig. In AIAA-2007-5052, éditeur : *43rd AIAA/ASME/SAE/ASEE Joint Propulsion Conference & Exhibit*, Purdue University, West Lafayette, Indiana, 2007.
- [21] A. A. KHARAZI, P. AKBARI et N. MÜLLER : An Application of Wave Rotor Technology for Performance Enhancement of R718 Refrigeration Cycles. In *2nd International Energy Conversion Engineering Conference AIAA 2004-5636*, pages 1–13, August 2004.
- [22] B. ENAUX, V. GRANET, O. VERMOREL, C. LACOUR, C. PERA, C. ANGELBERGER et T. POINSOT : Les and experimental study of cycle-to-cycle variations in a spark ignition engine. *Proc. Combust. Inst.* , 33:3115–3122, 2011.
- [23] V. GRANET, O. VERMOREL, C. LACOUR, B. ENAUX, V. DUGUÈ et T. POINSOT : Large-Eddy Simulation and experimental study of cycle-to-cycle variations of stable and unstable operating points in a spark ignition engine. *Combust. Flame* , 159(4):1562 – 1575, 2012.
- [24] H. PITSCH : Large eddy simulation of turbulent combustion. *Ann. Rev. Fluid Mech.* , 38:453–482, 2006.
- [25] S. RICHARD, O. COLIN, O. VERMOREL, A. BENKENIDA, C. ANGELBERGER et D. VEYNANTE : Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. Combust. Inst.* , 31:3059–3066, 2007.
- [26] O. VERMOREL, S. RICHARD, O. COLIN, C. ANGELBERGER, A. BENKENIDA et D. VEYNANTE : Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES. *Combust. Flame* , 156(8):1525–1541, 2009.
-

- [27] L. Y. M. GICQUEL, G. STAFFELBACH et T. POINSOT : Large eddy simulations of gaseous flames in gas turbine combustion chambers. *Prog. Energy Comb. Sci.* , 38(6):782 – 817, 2012.
- [28] T. POINSOT et D. VEYNANTE : *Theoretical and Numerical Combustion*. Third Edition (www.cerfacs.fr/elearning), 2011.
- [29] A. MISDARIIS : *Schémas cinétiques réduits et couplage thermique pour les simulations aux grandes échelles du cliquetis dans les moteurs à piston*. Thèse de doctorat, INP Toulouse, 2015.
- [30] A. ROBERT, S. RICHARD, O. COLIN et T. POINSOT : Les study of deflagration to detonation mechanisms in a downsized spark ignition engine. *Combustion and Flame*, 162(7):2788 – 2807, 2015.
- [31] Maxime PHILIP, Matthieu BOILEAU, Ronan VICQUELIN, Thomas SCHMITT, Daniel DUROX, Jean-François BOURGOUIN et Sébastien CANDEL : Simulation of the Ignition Process in an Annular Multiple-Injector Combustor and Comparison With Experiments. *J. Eng. Gas Turb. and Power* , 137(3):031501–9, mars 2015.
- [32] M. BOILEAU, G. STAFFELBACH, B. CUENOT, T. POINSOT et C. BÉRAT : LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame* , 154(1-2):2–22, 2008.
- [33] G. LACAZE, E. RICHARDSON et T. J. POINSOT : Large eddy simulation of spark ignition in a turbulent methane jet. *Combust. Flame* , 156(6):1993–2009, 2009.
- [34] J. M. DUCLOS et O. COLIN : Arc and kernel tracking ignition model for 3D spark ignition engine calculations. In *Fifth Int. Symp. on Diagnostics, Modelling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA)*, pages 343–350, Nagoya, Japan, 2001.
- [35] O. COLIN et K. TRUFFIN : A spark ignition model for large eddy simulation based on an fsd transport equation (issim-les). *Proc. Combust. Inst.* , 33(2):3097 – 3104, 2011.
- [36] R. MALY : Ignition model for spark discharges and the early phase of flame front growth. In *18th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1747–1754. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981.
- [37] R. MALY et M. VOGEL : Initiation and propagation of flame fronts in lean ch4-air mixtures by the threemodes of the ignition spark. In *17th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 821–831. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1978.
- [38] R. TEETS et J. SELL : Calorimetry of ignition sparks. *SAE transactions*, 97:371–383, 1988.
- [39] T.X. PHUOC et F.P. WHITE : Laser induced spark ignition of ch4/air mixtures. *Combust. Flame* , 119:203–216, 1999.
- [40] P. GUIBERT, A. KEROMNES et G. LEGROS : An experimental investigation of the turbulence effect on the combustion propagation in a rapid compression machine. *Flow, Turb. and Combustion* , 84:79–95, 2010.
- [41] M. AGUILAR : Réacteur, notamment réacteur pour aéronef. *Institut National de la Propriété Industrielle*, FR2945316 (A1), 2010.

-
- [42] D. R. BALLAL et A. H. LEFEBVRE : Ignition and flame quenching in flowing gaseous mixtures. *Proc. R. Soc. Lond. A* , 357:163–181, 1977.
- [43] M. CHAMPION, B. DESHAIES, G. JOULIN et K. KINOSHITA : Spherical flame initiation : Theory versus experiments for lean propane-air mixtures. *Combust. Flame* , 65(3):319–337, 1986.
- [44] D. BRADLEY et F.K.K. LUNG : Spark ignition and the early stages of turbulent flame propagation. *Combust. Flame* , 69(1):71–93, 1987.
- [45] C.C. HUANG, S.S. SHY, C.C. LIU et Y.Y. YAN : A transition on minimum ignition energy for lean turbulent methane combustion in flamelet and distributed regimes. *Proc. Combust. Inst.* , 31:1401–1409, 2007.
- [46] M. BAUM et T. POINSOT : Effects of mean flow on premixed flame ignition. *Combust. Sci. Tech.* , 106(1-3):19, 1995.
- [47] R. MOBASHERI et Z. PENG : Cfd investigation of the effects of re-entrant combustion chamber geometry in a hsd diesel engine. *International Journal of Mechanical, Aerospace, Industrial, Mechatronic and Manufacturing Engineering*, 7:349–359, 2013.
- [48] B. A. KHASAINOV et B. VEYSSIÈRE : Initiation of detonation regimes in hybrid two-phase mixtures. *Shock Waves*, 6:9–15, 1996.
- [49] G. CANTEINS : *Etude de la détonation continue rotative : Application à la propulsion*. Thèse de doctorat, Laboratoire de Combustion et de Détonique, 2007.
- [50] C. STROZZI, J. SOTTON, A. MURA et M. BELLENOUE : Experimental and numerical study of the influence of the temperature heterogeneities on self-ignition process of methane-air mixture in a rapid compression machine. *Combust. Sci. Tech.* , 36:1–29, 2008.
- [51] C. K. WESTBROOK, A. A. ADAMCZYK et G. A. LAVOIE : A numerical study of laminar flame wall quenching. *Combust. Flame* , 40:81–99, 1981.
- [52] N. BRANLEY et W. P. JONES : Large eddy simulation of a turbulent non-premixed flame. *Combust. Flame* , 127:1914–1934, 2001.
- [53] S. GORDON et B. J. MCBRIDE : Thermodynamic data to 20 000 k for monatomic gases. *Technical paper NASA TP-1999-208523*, 1999.
- [54] M. J. ZEHE, S. GORDON et B. J. MCBRIDE : Cap : A computer code for generating tabular thermodynamic functions from nasa lewis coefficients. *Technical paper NASA TP—2001-210959*, 2001.
- [55] C. ANGELBERGER : *Contributions a la modélisation de l'interaction flamme-paroi et des flux parietaux dans les moteurs a allumage commande*. Phd thesis, INP, Toulouse, 1997.
- [56] A. P. COLBURN : *A method of correlating forced convection heat transfer data and a comparison with fluid friction*, volume 174. Trans. AIChE, 1993.
- [57] S. JERZEMBECK, N. PETERS , P. PEPIOT-DESJARDINS et H. PITTSCH : Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combust. Flame* , 156(2):292–301, 2009.
-

- [58] David G. GOODWIN : Cantera code site, July 2009.
- [59] D. B. SPALDING : Mixing and chemical reaction in steady confined turbulent flames. *In 13th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 649–657. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1971.
- [60] D. B. SPALDING : Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion. *In 16th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1657–1663. The Combustion Institute, 1976.
- [61] B. E. LAUNDER et W. P. JONES : The prediction of laminarisation with a two-equations model of turbulence. *Int. J. Heat and Mass Transfer* , 15:301–314, 1972.
- [62] C. S. PESKIN : The Immersed Boundary Method. *Acta Numerica*, pages 479–517, juillet 2002.
- [63] R. VERZICCO, J. MOHD-YUSOF, P. ORLANDI et D. HAWORTH : Large eddy simulation in complex geometric configurations using boundary body forces. *AIAA Journal* , 38(3): 427–433, March 2000.
- [64] G. WANG, S. MOREAU, F. DUCHAINE, N. GOURDAIN et L. GICQUEL : Large Eddy Simulations of the MT1 high-pressure turbine using TurboAVBP. *In Proceeding of 21st Annual Conference of the CFD Society of Canada*, Sherbrooke, Quebec, Canada, 2013.
- [65] G. WANG, DD PAPADOGIANNIS, F. DUCHAINE, N. GOURDAIN et L. GICQUEL : Towards Massively Parallel Large Eddy Simulation of Turbine Stages. *In ASME Turbo Expo 2013*, San Antonio, Texas, USA, 2013.
- [66] A. N. KOLMOGOROV : The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *C. R. Acad. Sci. , USSR*, 30:301, 1941.
- [67] P. SAGAUT : *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer, Berlin, 1998.
- [68] J. BOUSSINESQ : Essai sur la théorie des eaux courantes. *26ème édn. Acad. Sci. Paris*, 1877.
- [69] F. NICOUD et T. POINSOT : Dns of a channel flow with variable properties. *In Int. Symp. On Turbulence and Shear Flow Phenomena.*, Santa Barbara, Sept 12-15., 1999.
- [70] J. SMAGORINSKY : General circulation experiments with the primitive equations : 1. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.* , 91:99–164, 1963.
- [71] C. W. HIRT, A.A. AMSDEN et J. L. COOK : An arbitrary lagrangian-eulerian computing method for all flow speeds. *J. Comput. Phys.* , 131(4):371–385, 1974.
- [72] V. R. MOUREAU, O. V. VASILYEV, C. ANGELBERGER et T. J. POINSOT : Commutation errors in Large Eddy Simulations on moving grids : Application to piston engine flows. *In Proc. of the Summer Program* , pages 157–168, Center for Turbulence Research, NASA AMES/Stanford University, USA, 2004.
- [73] V. MOUREAU, G. LARTIGUE, Y. SOMMERER, C. ANGELBERGER, O. COLIN et T. POINSOT : Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.* , 202(2):710–736, 2005.
- [74] C. S. PESKIN : Flow patterns around heart valves : A numerical method. *J. Comput. Phys.*, 10(2):252–271, 1972.

-
- [75] R. GHIAS, R. MITTAL et H. DONG : A sharp interface immersed boundary method for compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 225(1):528–553, juillet 2007.
- [76] Q. LIU et O. V. VASILYEV : A Brinkman penalization method for compressible flows in complex geometries. *J. Comput. Phys.*, 227(2):946–966, décembre 2007.
- [77] M. UHLMANN : An immersed boundary method with direct forcing for the simulation of particulate flows. *J. Comput. Phys.*, 209(2):448–476, novembre 2005.
- [78] P. J. ATZBERGER, P. R. KRAMER et C. S. PESKIN : A stochastic immersed boundary method for fluid-structure dynamics at microscopic length scales. *J. Comput. Phys.*, 224(2):1255–1292, juin 2007.
- [79] A. GILMANOV et F. SOTIROPOULOS : A hybrid cartesian/immersed boundary method for simulating flows with 3D, geometrically complex, moving bodies. *J. Comput. Phys.*, 207(2):457–492, août 2005.
- [80] G. IACCARINO et S. MOREAU : Natural and forced conjugate heat transfer in complex geometries on cartesian adapted grids. *J. Fluids Eng.*, 128(4):838, 2006.
- [81] P. K. SMOLARKIEWICZ, R. SHARMAN, J. WEIL, S. G. PERRY, D. HEIST et G. BOWKER : Building resolving large-eddy simulations and comparison with wind tunnel experiments. *J. Comput. Phys.*, 227(1):633–653, novembre 2007.
- [82] L. J. FAUCI et R. DILLON : Biofluidmechanics of reproduction. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 38(1):371–394, janvier 2006.
- [83] M. GARCIA : *Développement et validation du formalisme Euler-Lagrange dans un solveur parallèle et non-structuré pour la simulation aux grandes échelles*. Thèse de doctorat, 2009.
- [84] D. GOLDSTEIN, R. HANDLER et L. SIROVICH : Modeling a no-slip flow boundary with an external force field. *J. Comput. Phys.*, 105:354–366, 1993.
- [85] A. BONHOMME : *Numerical study of laminar and turbulent flame propagating in a fan-stirred vessel*. Phd thesis, INP Toulouse, 2014.
- [86] F. DUCHAINE, S. JAURÉ, D. POITOU, E. QUÉMERAIS, G. STAFFELBACH, T. MOREL et L. GICQUEL : High performance conjugate heat transfer with the OpenPALM coupler. In *IV International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering - Coupled Problems*, Ibiza, Spain, 2013.
- [87] A. PIACENTINI, T. MOREL, A. THÉVENIN et F. DUCHAINE : Open-palm an open source dynamic parallel coupler. In *IV International Conference on Computational Methods for Coupled Problems in Science and Engineering*, 2011.
- [88] D. GORYNTSEV, M. KLEIN, A. SADIKI et J. JANICKA : Large eddy simulation of fuel-air mixing in a direct injection SI engine. In *5th Symp. on Turb. and Shear Flow Phenomena*, Munich, Germany, 2007.
- [89] T. POINSOT, T. ECHEKKI et M. G. MUNGAL : A study of the laminar flame tip and implications for premixed turbulent combustion. *Combust. Sci. Tech.*, 81(1-3):45–73, 1992.
-

- [90] V. GRANET, O. VERMOREL, T. LEONARD, L. GICQUEL, et T. POINSOT : Comparison of nonreflecting outlet boundary conditions for compressible solvers on unstructured grids. *AIAA Journal* , 48(10):2348–2364, 2010.
- [91] O. COLIN, F. DUCROS, D. VEYNANTE et T. POINSOT : A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids* , 12(7):1843–1863, 2000.
- [92] A. SENGISSEN, J. F. Van KAMPEN, R. HULS, G. STOFFELS, J. B. W. KOK et T. POINSOT : Les and experimental studies of cold and reacting flows in a swirled partially premixed burner with and without fuel modulation. *Combust. Flame* , 150:40–53, 2007.
- [93] P. SCHMITT, T. POINSOT, B. SCHUERMANS et K. P. GEIGLE : Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner. *J. Fluid Mech.* , 570:17–46, 2007.
- [94] Pierre WOLF, Gabriel STAFFELBACH, Laurent Y M GICQUEL, Jens-Dominik MÜLLER et Thierry POINSOT : Acoustic and Large Eddy Simulation studies of azimuthal modes in annular combustion chambers. *COMBUSTION AND FLAME*, 159(11):3398–3413, novembre 2012.
- [95] M. BAUERHEIM, G. STAFFELBACH, N.A. WORTH, J.R. DAWSON, L.Y.M. GICQUEL et T. POINSOT : Sensitivity of les-based harmonic flame response model for turbulent swirled flames and impact on the stability of azimuthal modes. *Proc. Combust. Inst.* , 35(3):3355 – 3363, 2015.
- [96] S. S. SHY, C.C. LIU et W. T. SHIH : Ignition transition in turbulent premixed combustion. *Combust. Flame* , 157:341–350, 2010.
- [97] C. CARDIN, B. RENOU, G. CABOT et A. BOUKHALFA : Experimental analysis of laser-induced spark ignition of lean turbulent premixed flames : New insight into ignition transition. *Combust. Flame* , 160(8):1414–1427, 2013.
- [98] N. PETERS : The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *J. Fluid Mech.* , 384:107 – 132, 1999.
- [99] T. POINSOT et D. VEYNANTE : *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2001.
- [100] K. N. C. BRAY et J. B. MOSS : A unified statistical model of the premixed turbulent flame. *Acta Astronautica* , 4:291 – 319, 1977.
- [101] D. VEYNANTE, J. PIANA, J. M. DUCLOS et C. MARTEL : Experimental analysis of flame surface density model for premixed turbulent combustion. *In 26th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 413–420, Naples, 1996. The Combustion Institute, Pittsburgh.
- [102] S. RICHARD, O. VERMOREL et D. VEYNANTE : Development of LES models based on the flame surface density approach for ignition and combustion in SI engines. *In ECCOMAS Thematic Conference on computational combustion*, pages 1–20, 2005.
- [103] T. D. BUTLER et P. J. O’ROURKE : A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. *Proc. Combust. Inst.* , 16(1):1503 – 1515, 1977.

-
- [104] C. ANGELBERGER, D. VEYNANTE, F. EGOLFOPOULOS et T. POINSOT : Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. *In Proc. of the Summer Program*, pages 61–82. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998.
- [105] C. ANGELBERGER, F. EGOLFOPOULOS et D. VEYNANTE : Large eddy simulations of chemical and acoustic effects on combustion instabilities. *Flow, Turb. and Combustion*, 65(2):205–22, 2000.
- [106] J.-Ph. LÉGIER, T. POINSOT et D. VEYNANTE : Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. *In Proc. of the Summer Program*, pages 157–168. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2000.
- [107] J.-Ph. LÉGIER : *Simulations numériques des instabilités de combustion dans les foyers aéronautiques*. Phd thesis, INP Toulouse, 2001.
- [108] L. SELLE, G. LARTIGUE, T. POINSOT, R. KOCH, K.-U. SCHILDMACHER, W. KREBS, B. PRADE, P. KAUFMANN et D. VEYNANTE : Compressible large-eddy simulation of turbulent combustion in complex geometry on unstructured meshes. *Combust. Flame*, 137(4):489–505, 2004.
- [109] L. SELLE : *Simulation aux grandes échelles des interactions flamme-acoustique dans un écoulement vrillé*. Phd thesis, INP Toulouse, 2004.
- [110] T. POINSOT et D. VEYNANTE : *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition, 2005.
- [111] F. A. WILLIAMS : *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.
- [112] K. N. C. BRAY et R. S. CANT : Some applications of Kolmogorov’s turbulence research in the field of combustion. *Proc. R. Soc. Lond. A . A.N. Kolmogorov Special Issue*, 434(1890):217–240, 1991.
- [113] C. MENEVEAU et T. POINSOT : Stretching and quenching of flamelets in premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 86:311–332, 1991.
- [114] P. K. YEUNG, S. S. GIRIMAJI et S. B. POPE : Straining and scalar dissipation on material surfaces in turbulence : implications for flamelets. *Combust. Flame*, 79:340–365, 1990.
- [115] A. MISDARIIS, A. ROBERT, O. VERMOREL, S. RICHARD et T. POINSOT : Numerical methods and turbulence modeling for les of piston engines : Impact on flow motion and combustion. *Oil and Gas Science Tech.*, 69(1):83–105, 2014.
- [116] G. P. SMITH, D. M. GOLDEN, M. FRENKLACH, N.W. MORIARTY, B. EITENEER, M. GOLDENBERG, C. T. BOWMAN, R. K. HANSON, S. SONG et W. C. GARDINER : Gri-mech 3.0 mechanism site, 2009.
- [117] K. K. KUO : *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986.
- [118] B. FRANZELLI, E. RIBER, M. SANJOSÉ et T. POINSOT : A two-step chemical scheme for Large-Eddy Simulation of kerosene-air flames. *Combust. Flame*, 157(7):1364–1373, 2010.
-

- [119] G. BOUDIER, L. Y. M. GICQUEL, T. POINSOT, D. BISSIÈRES et C. BÉRAT : Effect of mesh resolution on large eddy simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combust. Flame* , 155(1-2):196–214, 2008.
- [120] D. BARRE : *Numerical simulation of ignition in aeronautical combustion chambers*. Phd thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2014.
- [121] L. ESCLAPEZ : *Numerical study of ignition and inter-sector flame propagation in gas turbine*. Phd thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2015.
- [122] G. LACAZE, B. CUENOT, T. J. POINSOT et M. OSCHWALD : Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration. *Combust. Flame* , 156(6):1166–1180, 2009.
- [123] O. COLIN, A. Pires Da CRUS et S. JAY : Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3d engine calculations. *Proc. Combust. Inst.* , 39:2649–2656, 2005.
- [124] D. PATTERSON : Cylinder pressure variations, a fundamental combustion problem. *In SAE Technical Paper 660129*, 1966.
- [125] M. RASHIDI : The nature of cycle-to-cycle variation in the SI engine from high speed photographs. *Combust. Flame* , 42:111–122, 1981.
- [126] Fanhua MA, Yu WANG, Haiquan LIU, Yong LI, Junjun WANG et Shangfen DING : Effects of hydrogen addition on cycle-by-cycle variations in a lean burn natural gas spark-ignition engine. *International Journal of Hydrogen Energy*, 33(2):823 – 831, 2008.
- [127] S. RICHARD, C. PERA et C. ANGELBERGER : Exploitation of multi-cycle engine les to introduce physical perturbations in 1d engine models. *SAE*, (2012-01-0127), 2012.
- [128] K. TRUFFIN, C. ANGELBERGER, S. RICHARD et C. PERA : Using large-eddy simulation and multivariate analysis to understand the sources of combustion cyclic variability in a spark-ignition engine. *Combust. Flame* , -Available online 21 October 2015-, 2015.
- [129] J. O. HIRSCHFELDER, F. CURTISS et R. B. BIRD : *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, 1964.
- [130] J. O. HIRSCHFELDER, C. F. CURTISS et R. B. BIRD : *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969.
- [131] R. J. KEE, F. M. RUPLEY et J. A. MILLER : Chemkin-ii : a fortran chemical kinetics package for the analysis of gas-phase chemical kinetics. Rapport technique, Sandia National Laboratories, 1991.

Annexe A

Equations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs

Les équations de Navier-Stokes sont ici décrites selon la formulation conservative utilisée dans le code AVBP. Elles correspondent aux équations non filtrées utilisées dans le cas de calculs DNS (Direct Numerical Simulation). Les équations filtrées sont énoncées dans la Sec. 3.2.

En l'absence de forces volumiques externes, le système d'équations de Navier-Stokes pour un écoulement réactif multi-espèces s'écrit de la manière suivante :

— **Conservation de la masse :**

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i) = 0 \quad (\text{A-1})$$

— **Conservation de la quantité de mouvement :**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u_j) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i u_j + p \delta_{ij} - \tau_{ij}) = 0 \quad (\text{A-2})$$

— **Conservation de l'énergie totale :**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i} (u_j (\rho E + p \delta_{ij} - \tau_{ij}) + q_i) = \dot{\omega}_T + \dot{Q} \quad (\text{A-3})$$

— **Conservation de l'espèce k :**

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_k) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho Y_k u_i) = \dot{\omega}_k - \frac{\partial}{\partial x_i} J_{j,k} \quad \text{pour } k = 1, N \quad (\text{A-4})$$

ρ est la densité, u_i représente la $i^{\text{ième}}$ composante de la vitesse, p est la pression, τ_{ij} est le tenseur des contraintes visqueuses, q_i est le tenseur des flux visqueux, $E = E_i + \frac{1}{2} \mathbf{u} \mathbf{u}$ est l'énergie

totale non chimique définie comme la somme de l'énergie sensible et de l'énergie cinétique, $\dot{Q}$ est un terme source énergétique, qui peut être dû par exemple à une bougie, un laser, ou un flux radiatif depuis l'environnement extérieur, $\dot{\omega}_T$ est le terme source chimique. $J_{j,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k , $\dot{\omega}_k$ son taux de production, et Y_k sa fraction massique.

Les lois nécessaires à la fermeture du système d'équations (A-1) à (A-4) sont les suivantes :

— **Loi des gaz parfaits**

La pression P qui intervient dans les Eq. (A-2) et (A-3) se calcule à partir de l'équation d'état des gaz parfaits :

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{W} T \quad (\text{A-5})$$

où T est la température du mélange et $\mathcal{R}$ la constante universelle des gaz parfaits ($\mathcal{R}=8.314 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$).

— **Tenseur des contraintes visqueuses**

En supposant le fluide Newtonien et grâce à l'hypothèse de Stokes, le tenseur des contraintes visqueuse τ s'exprime à partir du tenseur des contraintes S_{ij} :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{kk} \right) \quad \text{avec :} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (\text{A-6})$$

μ est la viscosité dynamique et δ_{ij} est le delta de Kronecker.

— **Flux diffusif des espèces**

Le flux diffusif des espèces est ici exprimé selon l'approximation de Hirschfelder et Curtiss [129] qui suppose une vitesse de diffusion inter-espèces $D_{k,j}$ égale pour toutes les espèces ($D_{k,j} = D_k$) :

$$J_{j,k} = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \quad (\text{A-7})$$

X_k est la fraction molaire de l'espèce k définie par $X_k = Y_k W / W_k$. V_i^c est une vitesse de diffusion corrective pour assurer la conservation de la masse totale de gaz [110] :

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (\text{A-8})$$

— **Flux de chaleur**

Le flux de chaleur total q_i est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction, que l'on modélise par une loi de Fourier, et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces. Il s'écrit :

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} - \underbrace{\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (\text{A-9})$$

où λ est la conductivité thermique du mélange et $h_{s,k}$ représente l'enthalpie sensible de l'espèce k .

— Termes sources chimiques

Lors du processus de combustion, des réactifs sont transformés en produits à partir du moment où l'énergie apportée au système est suffisante pour activer la réaction. Le modèle de combustion qui est implanté dans AVBP est une loi de type Arrhénius impliquant N réactifs, notés $\mathcal{M}_{kj}$, et M réactions. Le système de réactions s'écrit sous la forme :

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \quad j = 1, M \quad (\text{A-10})$$

Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est défini par l'Eq. A-11 comme la somme des taux de réaction $\dot{\omega}_{kj}$ de l'espèce k dans chaque réaction j , j variant de 1 à M :

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (\text{A-11})$$

où $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$ sont les coefficients stoechiométriques globaux de la réaction, ν'_{kj} et ν''_{kj} sont respectivement les coefficients stoechiométriques des réactifs et des produits de la réaction. $\mathcal{Q}_j$ est le taux d'avancement de la réaction j définie par :

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (\text{A-12})$$

où $K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont respectivement les constantes des réactions directe et inverse définies respectivement par :

$$K_{f,j} = A_{f,j} \exp \left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T} \right) \quad (\text{A-13})$$

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (\text{A-14})$$

$A_{f,j}$ est le facteur pré-exponentiel et $E_{a,j}$ est l'énergie d'activation. $K_{r,j}$ est imposé par

l'hypothèse d'équilibre thermodynamique. K_{eq} est la constante d'équilibre [117] définie par :

$$K_{eq} = \left(\frac{P_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp \left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T} \right) \quad (\text{A-15})$$

La pression de référence est égale à $P_0 = 1 \text{ bar}$. ΔH_j^0 est la variation d'enthalpie totale (sensible et chimique) et ΔS_j^0 la variation d'entropie pour la réaction j . Ces deux grandeurs sont définies par :

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (\text{A-16})$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} s_k(T) \quad (\text{A-17})$$

$$(\text{A-18})$$

où $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température $T_0 = 0 \text{ K}$. Le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ s'exprime finalement par :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (\text{A-19})$$

— Propriétés de transport

Dans la plupart des codes de mécanique des fluides utilisant un mélange de plusieurs espèces, la viscosité dynamique μ est supposée indépendante de la composition du mélange¹. La loi puissance est une approximation réaliste qui prend en compte les variations de la viscosité dynamique en fonction de la température :

$$\mu = \mu_{ref} \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^b \quad (\text{A-20})$$

où μ_{ref} est la viscosité mesurée à la température T_{ref} généralement dans le mélange de gaz frais. L'exposant b est typiquement dans la plage 0.5-1.0.

La conductivité thermique du mélange, qui utilise un nombre de Prandtl Pr supposé constant, est définie par l'Eq. A-21. La diffusivité thermique est définie par l'Eq. A-22.

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad (\text{A-21})$$

$$D_{th} = \frac{\mu}{\rho Pr} \quad (\text{A-22})$$

1. Les erreurs liées à cette hypothèse sont faibles tant que le mélange est un gaz parfait

Par soucis de réduction de coûts de calcul, le code AVBP n'utilise pas les coefficients de diffusion moléculaire D_k exacts, qui sont déterminés à partir de la théorie cinétique des gaz [130]. On adopte donc une approche simplifiée en faisant l'hypothèse que les nombres de Schmidt de chaque espèce Sc_k sont constants. La diffusivité moléculaire D_k est alors définie par :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (\text{A-23})$$

où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant. Pr et Sc_k modélisent la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Leurs valeurs sont obtenues à l'aide du logiciel PREMIX, inclus dans l'ensemble logiciel CHEMKIN [131], en calculant leur valeur dans les gaz brûlés dans un calcul de flamme plane laminaire de prémélange.

Annexe B

Article soumis à *Combustion and Flame*

Cette annexe présente le manuscrit de l'article soumis à *Combustion and Flame* en 2015. Il contient principalement la description des résultats de LES avec combustion et la comparaison avec les expériences de Pprime.

Experimental and numerical study of cyclic variations in a Constant Volume Combustion Chamber

Laure Labarrere^a, Thierry Poinso^b, Antoine Dauplain^{a,*}, Florent Duchaine^a,
Marc Bellenoue^c, and Bastien Boust^c

^a*CERFACS, 42 Avenue Gaspard Coriolis 31057 Toulouse Cedex 01 France*

^b*CNRS - IMFT, 1 Allée du Professeur Camille Soula, Toulouse 31400 Cedex, France*

^c*Institut PPRIME, CNRS-ENSMA-Université de Poitiers, 86961, France*

Abstract

This paper describes a joint experimental and numerical study of a Constant Volume Combustion (CVC) chamber for propulsion engines. Combustion takes place in a constant volume vessel where gases are injected from a pressurized air inlet using valves. They are ignited using a spark and exhaust through a second set of valves. Like piston engines, CVC combustion raises multiple questions linked to the volumetric efficiency of the valves, the heat losses to the chamber walls, the ignition in a strongly turbulent flow, the influence of residual gases. These issues can compromise the potential gains associated to constant volume combustion. They are investigated in an experimental setup and compared to a full compressible LES. The major conclusion is the existence of significant cyclic variations which are observed in the experiment and analyzed in the LES: the local flow velocity at spark timing and the level of residuals are the major factors leading to cyclic variations. Cycles also appear to be coupled: combustion during cycle N directly affects cycle $(N+1)$, more than in a piston engine.

Keywords: Constant volume combustion, Large Eddy Simulation, Turbulent flames

*Corresponding author

Email addresses: dauplain@cerfacs.fr (Antoine Dauplain), duchaine@cerfacs.fr (Florent Duchaine)

1. Introduction

Constant Volume Combustion (CVC) is one of the thermodynamic cycles considered for future aeronautical engines because its cycle potentially offers a thermodynamic efficiency which is higher than what constant pressure combustion chambers can reach. Various technologies can be used to achieve a constant volume combustion, many of them based on supersonic combustion and detonation engines [1, 2, 3]. Another path is to rely on subsonic combustion in chambers using inlet and outlet valves (as in a piston engine) to ensure that combustion takes place in a constant volume vessel. Modern Diesel engines clearly demonstrate that constant volume combustion can lead to very high efficiencies. Whether such cycles can be applied to a gas turbine remains an open question.

Understanding flow and combustion processes in CVC chambers requires to tackle many daunting tasks which have been well identified in recent research [4, 5] on LES of piston engines¹ :

- Since subsonic CVC devices use inlet and outlet valves, handling complex geometry and moving meshes is a necessity, thereby requiring specific solvers. Experimentally, this requires also a careful characterization of inlet and outlet feeding lines.
- CVC flows are clearly unsteady, going from intake phases at high speed to low speed combustion phases and high speed, high temperature exhaust phases. The combustion phase itself is dominated by turbulent processes and large-scale structures of the flow: turbulence during this phase is entirely created during the intake phase, calling for precise methods to evaluate turbulence and turbulent combustion processes. Large Eddy Simulation (LES) is the best option in this field [6, 7, 8, 9, 10]. Experimentally, all difficulties encountered in piston engines also appear

¹A CVC chamber such as the one studied here, has many common aspects with a turbo-charged piston engine where the piston position would be fixed.

here: multiple cycles are needed to perform averages, strong cycle-to-cycle variations make analysis complicated and require to use statistical methods. No direct comparison can be performed between individual cycles measured in the experiment or computed by the LES.

- Heat losses to walls are important and must be modelled adequately because they control the overall efficiency. Characterizing heat losses experimentally is also difficult because unsteady heat fluxes have to be measured locally [11].
- Chemistry plays a strong role and must be modelled with precision to capture both flame propagation and possible reignition or autoignition events as well as wall quenching phenomena.
- In a piston engine, the turbulence created during the intake phase is dissipated during the compression phase. In a CVC chamber, the absence of compression phase also implies the ignition must be performed in a high velocity flow, leading to additional difficulties.
- Controlling the ignition phase is more critical in CVC chambers than it is in gas turbines [12, 13] because the spark timing also controls the efficiency: while, in the ideal cycle, combustion takes place in a closed volume, in the real world, valves have to be opened and closed at moments which do not necessarily allow combustion to go to completion, thereby letting fresh gases exhaust and leading to poor efficiencies if ignition events are not phased correctly with intake and exhaust valves. Providing reasonable models for ignition in LES [14, 15, 7, 16] also remains a challenge because the plasma phases, which control ignition, are still out of reach of 3D simulation tools: in most models, these phases are simply neglected and replaced either by a local energy deposition or by the introduction of a sphere of burned gases at an arbitrary temperature when the ignition phase is supposed to be finished. Another difficulty is associated to the determination of the energy which is really released into the flow by the

spark in the experiment [17, 18, 19]: very large losses are expected and only 10 to 30 percent of the spark energy is actually transferred to the flow even if a laser is used instead of a spark [20]. This large uncertainty
60 on the exact energy to inject into the gas directly often leads to uncertain LES/experiments comparisons.

Of course, all these phenomena are coupled: the intensity of turbulence and the performance of the ignition system at the moment of spark ignition control the combustion speed and therefore the efficiency of the cycle. In piston engines,
65 large-scale structures are destroyed during compression, thus creating small-scale turbulence that favors flame acceleration. For a CVC system to be efficient, combustion must be fast and this is the reason why detonation is often preferred. Here a subsonic CVC chamber is investigated, leading to flame speeds which are three orders of magnitude smaller than detonation velocities. Ensuring that
70 combustion takes place sufficiently fast can be only obtained by maintaining high levels of turbulence. But when the combustion phase begins, valves must be closed (for combustion to proceed at constant volume) so that turbulence is already decaying and keeps decaying during the flame propagation. Imposing a very high initial turbulence at the moment when the inlet valves close may
75 be a solution but in this case the ignition system may have difficulties igniting the flow reliably: misfires may occur. Like in a piston engine, the compromise between all these phenomena may lead to performances which are smaller than what the ideal CVC cycle was promising.

This paper presents a joint experimental / numerical study of flow and com-
80 bustion processes in a subsonic CVC experiment installed at Institut PPRIME in Poitiers. LES is used to reproduce the experiment and analyse the various phases controlling the CVC operation over multiple cycles. The target configuration and the experimental results are presented in Section 2. The numerical method used for LES is described in Section 3. LES and experiments are first
85 compared for non-reacting cases (Section 4) where the valves are operating and the flow is controlled by the pressure difference between the plenum and the

outside atmosphere. Reacting cases are discussed in Section 5 which focuses on mechanisms leading to cyclic variations and describes an instability mechanism between cycles where cycle N directly affects the efficiency of cycle (N+1).

90 These instabilities lead to large variations between individual cycles which have to be understood and avoided. Combining experiments and LES is shown to be a good method to achieve these goals.

2. Experimental setup

The experimental system developed in PPRIME is based on an original
95 combustor designed by COMAT, that features the successive phases of a CVC cycle (intake, combustion, exhaust) using patented rotary valves for intake and exhaust (french patent FR2945316 2009) (Fig. 1). The combustion chamber is a stainless steel vessel of inner volume 0.65 L, placed downstream of a carburation chamber, and followed by an exit duct to the atmosphere.

100 Combustor cycle

The operation of the combustor is governed by several events that occur successively during the cycle (Fig. 2), under supervision of a process controller. The symmetric geometry of the valves allows the succession of cycles every 180° of valve rotation (two full cycles per rotation) ; the rotation of the 4 valves is per-
105 formed by a step motor at constant rotation speed $d\theta/dt$. The phasing between the inlet and outlet valves is defined by the angle ϕ between the crank angles where the exhaust and inlet valves are fully open respectively. During each cycle, the air-fuel mixture is prepared in the carburation chamber, introduced through the intake valves and spark-ignited inside the combustion chamber.
110 Combustion propagates in the chamber before burned gases are ejected through the exhaust valves. The cycle exhibits a scavenging phase during exhaust, thus creating an intense flow from the carburation chamber to the exit duct.

The combustor is placed downstream of an air feed line that allows a precise control of the air flowrate F_{air} , including a compressor (400 g/s, 1.3 MPa), a
115 regulation of temperature T_{air} (electrical heater TATT, 100 kW, up to 200°C)

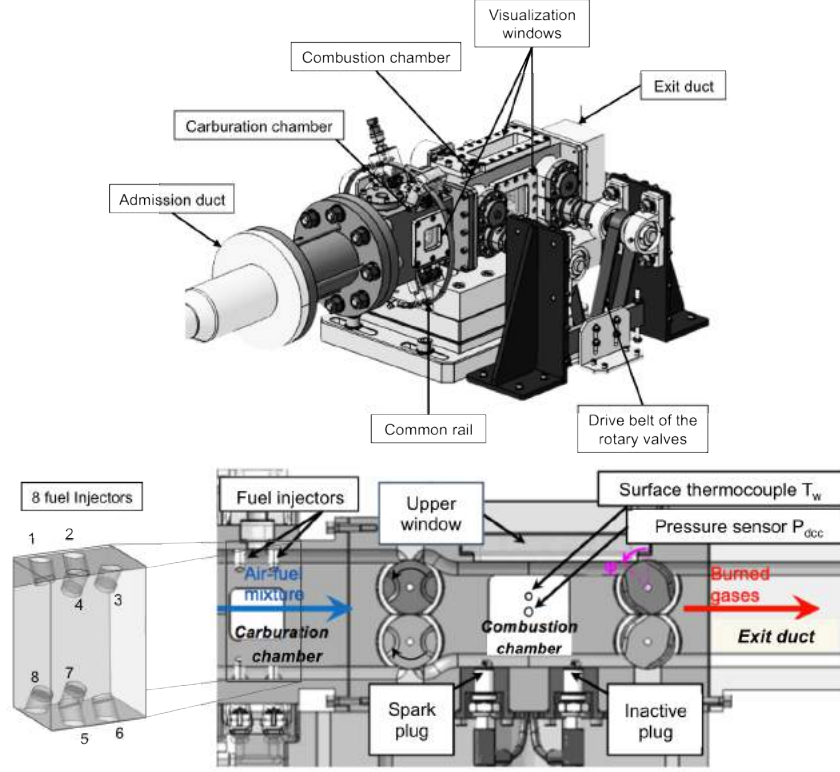


Figure 1: CVC experiment installed at Institut PPRIME. Top image: global view. Bottom left: zoom on the 8 injectors. Bottom right: view of the combustor.

and pressure P_{air} (dome pressure regulator IMF). Stagnation conditions are controlled in a 65 L isolated buffer tank placed between the feed line and the combustor in order to stabilize the upstream conditions of the combustor. The combustor is fueled with liquid iso-octane (VWR, < 0.01% water) through 8 injectors (Bosch EV14, SMD 200 μm) placed symmetrically in the carburation chamber (Fig. 1). Fuel injection for each cycle is performed in the carburation chamber sequentially: injectors 1 and 2 are activated first, followed by 3 and 4, 5 and 6, 7 and 8 (Fig. 2). Ignition is performed in the center of the chamber by a capacitive discharge ignitor (0-300 mJ) and a spark plug with tailored electrodes.

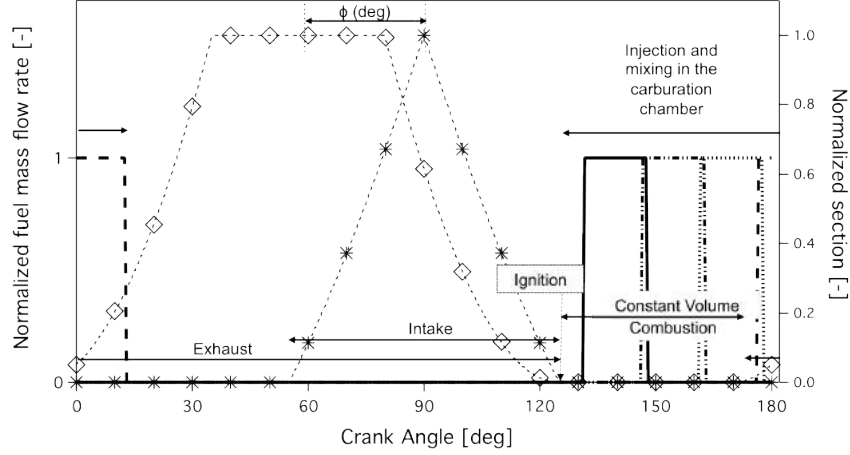


Figure 2: One cycle of the combustor. (*) Intake section. (◇) Exhaust section. (—) Flow rate for injector 1 and 2. (---) Flow rate for injectors 3 and 4. (.....) Flow rate for injectors 5 and 6. (-.-.-) Flow rate for injectors 7 and 8.

Diagnostics

Table 1 presents the diagnostics used in the experiment to measure: air flowrate F_{air} , air pressure P_{air} , air temperature T_{air} , wall temperature in the combustion chamber T_p . The controller allows to choose the cycle frequency f , the ignition crank angle θ_{igni} and the mass of fuel to be injected per cycle.

Time-resolved measurements are carried out to characterize the flow dynamics upstream of the combustor thanks to static pressure sensors placed in the carburation chamber (P_{adm} , Fig. 3) and in the combustion chamber (P_{cc} , Fig. 3). These parameters are recorded using a high-speed acquisition device (Astromed TMX, 16 bit, 400 kHz). The propagation of the flame front is recorded by direct visualization of chemiluminescence using a high-speed color camera (Phantom v310, 3 kHz, 12 bit) and lateral and upper sapphire windows.

3. Numerical method and simulation setup

To analyze the experimental results, an LES was performed using a compressible solver called AVBP [21, 22, 9] adapted to complex geometries and mov-

Table 1: Physical instrumentation of the facility

Label	Physical diagnostic	Sensor technology	Reference	Uncertainty	Bandwidth
Fair	Air mass flow rate	Coriolis flowmeter	Endress 80F40	0.15%	10 Hz
Tair	Stagnation air temperature	Isolated K-thermocoupler	SS, 1.58 mm	1°C	10 Hz
Pair	Stagnation air pressure	Piezoresistive pressure gauge	Druck Unik5000	0.04%	300 Hz
Padm	Absolute pressure in the carburation chamber	Piezoresistive pressure sensor	Kistler 4007B	0.2%	40 kHz
Tp	Wall temperature in the combustion chamber	Isolated K-thermocouple	SS, 1.58 mm	1°C	10 Hz
Pcc	Absolute pressure in the combustion chamber	Piezoelectric pressure sensor	Kistler 6125C	1.5%	70 kHz
Tw	Wall heat flux	Surface E-thermocouple	Nanmac E12-3	1°C	100 kHz
θ	Angle of rotary valve	Incremental encoder	Kubler 5823	0.1°	300 kHz

ing meshes. The numerical scheme is the finite volume Lax-Wendroff scheme (2nd order accurate in space and time) and the integration in time is explicit, limited by the acoustic CFL number condition.

A major difficulty linked to the CVC configuration is the need to preserve
145 LES type accuracy while handling moving meshes. This is a usual problem for piston engines simulations [5, 23] for which ALE techniques are commonly used. Another usual method for complex moving geometries is the IB approach (immersed boundaries [24, 25]). For the CVC chamber of Fig. 1 however, where rotating valves are used, tests using ALE or IB showed that a different approach
150 was required: the present LES utilizes an overset grid method used for turbo-machinery computations [26, 27, 28] called MISCOG. This method allows to insert a moving domain (or many of them) within a fixed domain as shown in Fig. 3. One AVBP instance (AVBP01) computes all the points linked to the fixed part of the system: inlet, chamber and outlet. Four additional AVBP in-
155 stances (AVBP02 to 05 in Fig. 3) handle the four moving valves. Overset grids (Fig. 3 bottom) around each valve are used to exchange information between the fixed domain instance and each of the moving instances. High-order extrapolations (usually 3rd order) are used to reconstruct residuals and exchange them between instances. The accuracy of the method has been tested on multiple
160 academic tests [26, 27].

The simulation includes all elements of the real CVC chamber except one: the liquid fuel injection. While the real CVC chamber of Pprime is fed with liquid fuel, the LES setup assumes that vaporization is fast and that the liquid fuel injection can be replaced by gaseous fuel jets with the same timing (Fig. 2) and flow rates. This assumption was estimated to be acceptable because most interesting phenomena take place in the chamber where vaporization is supposed to be completed. This model will have to be replaced in the future by an LES taking into account liquid fuel injection [29] especially for regimes where droplets impinge on valves and create films but the simulation of the liquid phase was viewed as a phenomenon which could be included in a second study.

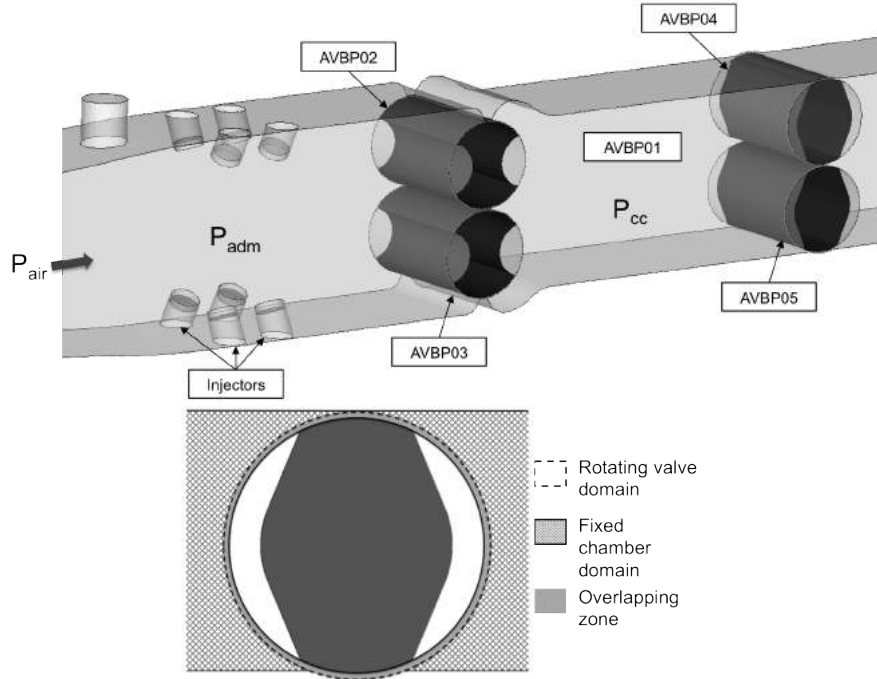
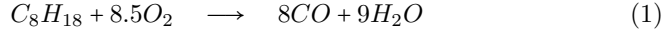


Figure 3: The MISCOG method for moving objects applied to the CVC chamber. Five instances of the LES code are used: one for the inlet, chamber and outlet domain and four others for each valve. Top: general view. Bottom: zoom on the overlapping regions used for the MISCOG overset method.

Combustion is modeled using Arrhenius type reaction rates and a two-step scheme is used to describe the chemistry for C_8H_{18} -air flames. Reaction (1) controls the flame speed while the CO - CO_2 equilibrium of reaction (2) allows burned gases to reach the correct adiabatic temperature at all operating point conditions (pressure, temperature and equivalence ratio).



The forward reaction rates for these two reactions are expressed below. A_i is the pre-exponential factor, $E_{a,i}$ is the activation energy of reaction i , and the $n_{k,i}$ are the reaction exponents for specie k in reaction i (Table 2).

$$k_{f,1} = A_1 e^{\frac{-E_{a,1}}{RT}} [C_8H_{18}]^{n_{C_8H_{18}}} [O_2]^{n_{O_2,1}} \quad (3)$$

$$k_{f,2} = A_2 e^{\frac{-E_{a,2}}{RT}} [CO]^{n_{CO}} [O_2]^{n_{O_2,2}} \quad (4)$$

Table 2: Arrhenius parameters for the C8H18 2 step scheme.

	A [$cm^3/mol.s$]	E_a [cal/mol]	Reaction exponents n_k [-]	
C_8H_{18} oxidation	9.443×10^{12}	3.6×10^4	$n_{C_8H_{18}} = 1.1$	$n_{O_2,1} = 0.54$
CO - CO_2 equilibrium	2.0×10^9	1.4×10^4	$n_{CO} = 1.0$	$n_{O_2,2} = 0.5$

All walls are treated as no-slip isothermal walls ($T_{wall} = 400$ K). The interaction between turbulence and flame is modeled using the thickened flame model (TFLES) [4, 30, 31, 32, 33, 34] while the ignition model corresponds to energy deposition (ED model) over a sphere of fixed size during a fixed time [14] using Gaussian shaped filters in space and time. The ED model has been used in gas turbine [35, 36], rocket engines [37], jet flames [14] and piston engines [8, 4, 5]². The total energy deposited into the flow is controlled and called ϵ_i . If the sparking instant is t_i , the local power $\dot{Q}$ deposited in the flow is expressed

²Other models for ignition could have been used [16, 38] but the ED formulation is the most adapted one with the TFLES model.

as [14]:

$$\dot{Q} = \frac{\epsilon_i}{4\pi^2\sigma_s^3\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}(\frac{r}{\sigma_s})^2} e^{-\frac{1}{2}(\frac{t-t_i}{\sigma_t})^2} \quad (5)$$

where σ_s control the spatial extent of the energy deposition: $\sigma_s = \Delta_s/a$ where $a = 4\sqrt{\ln(10)}$ and Δ_s is the characteristic size of the sphere where energy is deposited. Similarly, σ_t fixes the duration of the spark: $\sigma_t = \Delta_t/a$ and Δ_t is the spark duration. By construction, 98 percent of the energy is deposited in a sphere of radius Δ_s over the time Δ_t : $\int_0^{\Delta_s} \int_{t_i-\Delta_t}^{t_i+\Delta_t} \dot{Q} 4\pi r^2 dr dt = 0.98 \int_0^\infty \int_0^\infty \dot{Q} 4\pi r^2 dr dt = 0.98\epsilon_i$. The value of the total energy deposited in the gas ϵ_i is imposed as $\epsilon_i = kE$ where E is the electrical power of the spark and k a loss coefficient which was fixed to 0.8. For the PPRIME experiment, a powerful spark was used and E was of the order of 300 mJ, much more than the minimum ignition energy in such a flow (of the order of 30 mJ) [39]. During the energy deposition phase, the TFLES model is not activated: flame thickening begins only when the flame starts to propagate as a premixed front and the temperature is close to the adiabatic flame temperature.

4. Cold flow results

Description of the operating point

In a first step, cycles were simulated and compared to the experiment for an operating point OP1 (Table 3) for inert conditions, using the following parameters: $T_{air} = 120^\circ\text{C}$, $f = 40$ Hz ($N = 1200$ rpm), $\phi = 35.3^\circ$. The pressure is normalized by the upstream flow pressure P_{air} and intake and exhaust sections are normalized by their maximum values.

Figure 4 shows that the normalized pressure in the combustion chamber P_{cc}/P_{air} decreases from maximum pressure ($P_{cc}/P_{air} = 0.9$ at $\theta = 125^\circ$) to exhaust pressure ($P_{cc}/P_{air} = 0.33$ at $\theta = 45^\circ$) during the exhaust phase. When the intake valves open ($\theta = 55^\circ$), pressure goes up again until the chamber is filled for $\theta = 125^\circ$. The pressure in the carburation chamber P_{adm}/P_{air} varies from 0.85 to 1.05 and is correctly captured by LES (Fig. 4).

An interesting output of the computation is the mean flow rate through the burner which controls the volumetric efficiency. Table 4 gives this quantity for cold (OP1) and reacting conditions (OP2 and OP3) and shows that LES captures the experimental flow rate within 5%. This is not an obvious result because LES has to capture pressure losses for all areas of the inlet and outlet sections in order to correctly predict the mean flow rate.

Table 3: Operating points tested in the CVC chamber.

Operating point	Rotation speed [rpm]	Phasing ϕ [deg]	Reacting case	Upstream flow temperature [°C]	Normalized upstream flow pressure [-]	Normalized downstream flow pressure [-]
OP1	1200	35.3	No	120	1	0.33
OP2	1200	35.3	Yes	120	1	0.33
OP3	1500	35.3	Yes	120	1	0.33

Table 4: Mean air flow rate [g/s]

Operating point	Experimental Mean air flow rate [g/s]	LES Mean air flow rate [g/s]
OP1	104	102
OP2	85	90
OP3	100	95

Figure 4 also shows that the experimental pressure decreases slowly from 125 to 170 degrees when all valves are closed, indicating that the experiment is slightly leaking. During the same time, the LES pressure also decays slowly, confirming that there are "numerical" leaks introduced by the MISCOG method but that they are actually comparable to the leaks observed experimentally. The leaks in the LES are due to the small overlap region grids around the valves. They can be adjusted by changing the size of this region but this was not necessary here. The maximum normalized pressure P_{cc}/P_{air} (0.9) is correctly predicted by LES. Ten cycles were computed using LES and little variability was observed on pressure curves. This is not surprising for non-reacting cases and it indicates that the volumetric efficiency of the system (the mass of trapped air when all valves are closed normalized by the maximum value it would take

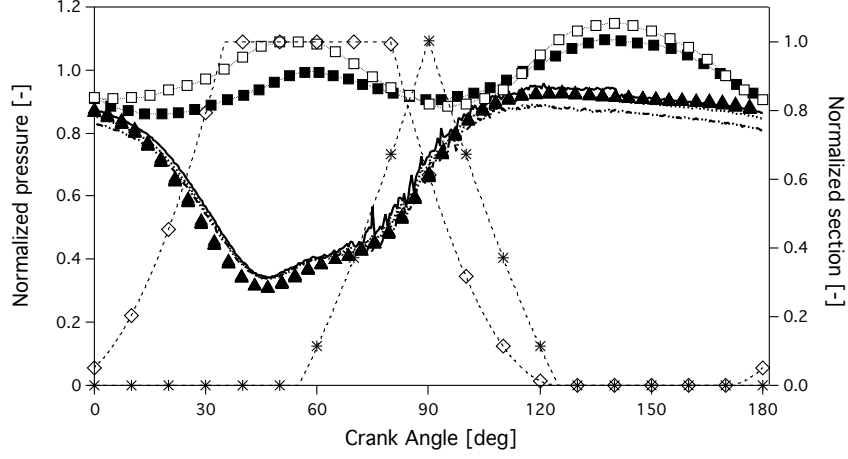


Figure 4: OP1 (Table 3) - Pressure evolution as a function of cycle angle for 10 consecutive cycles. ($\blacktriangle$) LES pressure in the combustion chamber P_{cc}/P_{air} . (—) Experimental maximum pressure in the combustion chamber. (---) Experimental minimum pressure in the combustion chamber. (.....) Experimental mean pressure in the combustion chamber. ($\blacksquare$) LES pressure in the carburation chamber P_{adm}/P_{air} . ($\square$) Experimental pressure in the carburation chamber. (*) Intake section. ($\diamond$) Exhaust section.

if the chamber pressure would reach the upstream pressure in the feeding tank P_{air}) is weakly dependent on the cycle realizations. This volumetric efficiency, evaluated when the intake valves close, is 94% for this case.

5. Analysis of reacting CVC point OP2 (1200 rpm)

220 The reacting point OP2 (Table 3) corresponds to the same condition as OP1. 40 cycles ($N=1200$ rpm) burn per second and ignition takes place at intake valve closure: $\theta = 125^\circ$ (Table 5). The total isooctane injection rate is 160 mg/cycle (mean equivalence ratio = 1.2).

Table 5: Experimental and simulation parameters for reacting cases OP2 and OP3

Operating point	Rotation speed (rpm)	Fuel	Mass of fuel injected per cycle [g]	Ignition angle θ_{igni} [deg]	Spark energy [mJ]
OP2	1200	C_8H_{18}	0.160	125	300
OP3	1500	C_8H_{18}	0.160	125	300

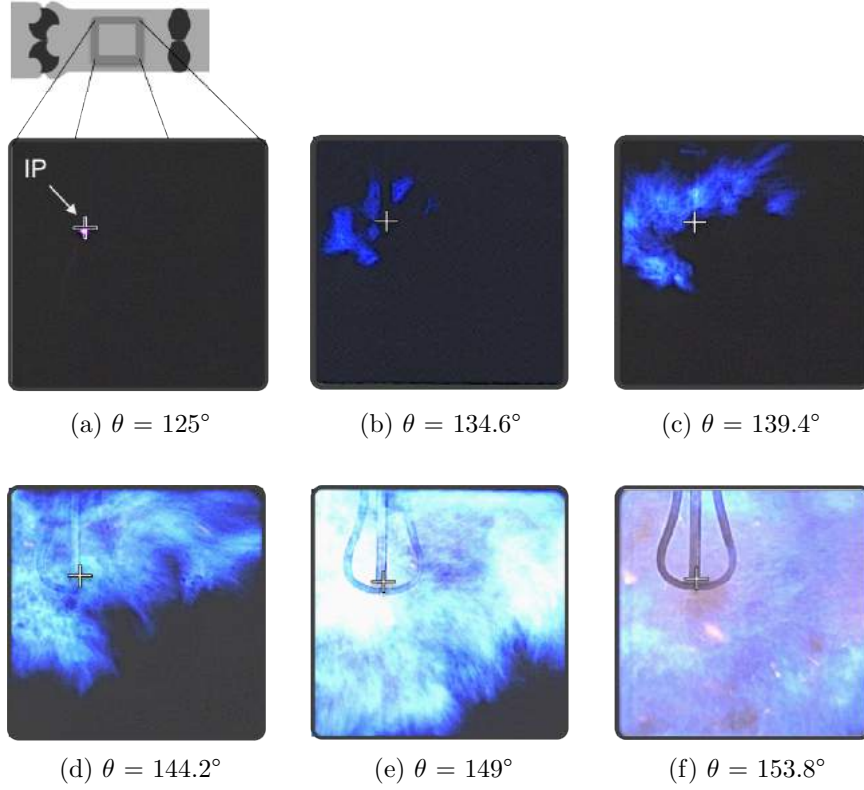


Figure 5: Experimental results: flame propagation for one cycle for OP2. IP indicates the point where the spark is produced.

Flame propagation

Figure 5 shows the flame propagation during one of the experimental cycles at the operating point OP2. After spark ignition, the flame propagates quickly from the ignition point (IP in Fig. 5). The flame is very corrugated, indicating a highly turbulent flow inside the chamber. After $\theta = 149^\circ$ (Fig. 5e), yellow spots indicate soot formation at the end of the cycle.

Pressure evolution in the combustion chamber

As in spark ignition piston engines, cyclic fluctuations are observed on pressure time-evolutions (Fig. 6). The theoretical maximum pressure P_{adia}/P_{air} which should be reached at constant volume for a perfect volumetric efficiency

235 can be calculated in an equilibrium code like Cantera [40] and is $P_{adia}/P_{air} = 7.5$
(for constant volume combustion, equilibrium computations at the equivalence
ratio of OP2 provide a temperature variation T_{adia}/T_{air} of 6.5 and a pressure
increase P_{adia}/P_{air} of 7.5). The pressure curves measured experimentally vary
from cycle to cycle and Fig. 6 displays the mean pressure curve as well as the
240 maximum and minimum pressure curves obtained for all experimental cycles
(80 cycles were used experimentally to construct these curves) leading to two
observations:

- The maximum pressure reached in the experiment (from 2.7 to 4.5, de-
pending on the cycle) is always lower than the theoretical value P_{adia}/P_{air}
245 $= 7.5$, showing that the expected efficiency is not reached.
- Strong cycle-to-cycle variations and even almost complete misfires are ob-
served experimentally. These phenomena are very similar to cyclic vari-
ations obtained in high performance piston engines [4, 5, 8] and indicate
that the turbulent combustion phase in this system is unstable either be-
250 cause ignition is too long or too weak or because the turbulent propagation
speed varies from cycle to cycle.

Two questions are addressed in the next sections: (1) which losses can ex-
plain the fact that pressure is less than expected and (2) where do the cycle-to-
cycle variations come from ?

255 Like in a piston engine, multiple factors may explain that the maximum
pressure is lower than expected: fuel stratification during the intake phase,
scavenging difficulties leading to high level of residual burned gases from the
previous cycle, incomplete combustion, failed or insufficient ignition, excessive
260 heat losses can decrease the cycle efficiency. The problem of cyclic variations
has been studied in engines for a very long time [41, 42] and has not been solved
yet [43, 8]. Obviously, turbulence and the associated flow randomness at the
moment of spark timing play a major role. Since CVC flows must have large
turbulence intensity to promote fast combustion, it is logical to also expect cycle

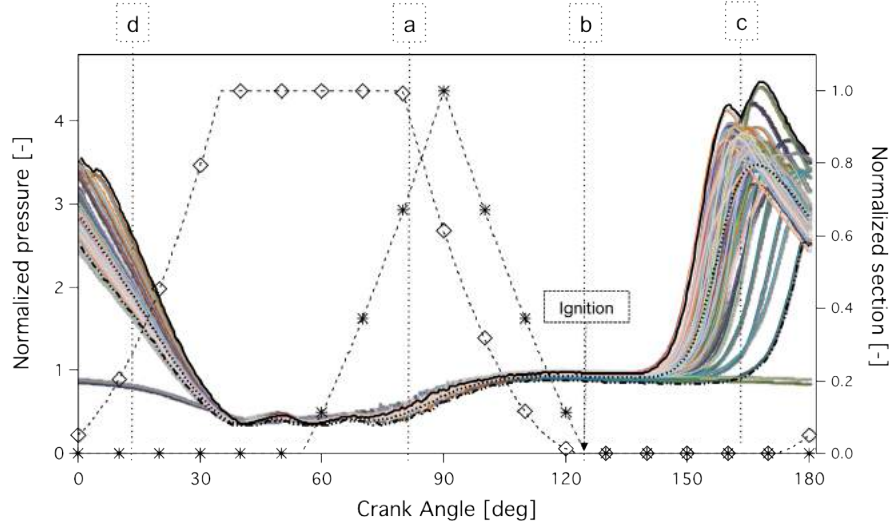


Figure 6: Experimental results for reacting case OP2. (grey shaded solid lines) Pressure in the combustion chamber over 80 cycles. (—) Experimental maximum pressure in the combustion chamber. (- - -) Experimental minimal pressure in the combustion chamber. (.....) Experimental mean pressure in the combustion chamber. (*) Intake section. (◇) Exhaust section.

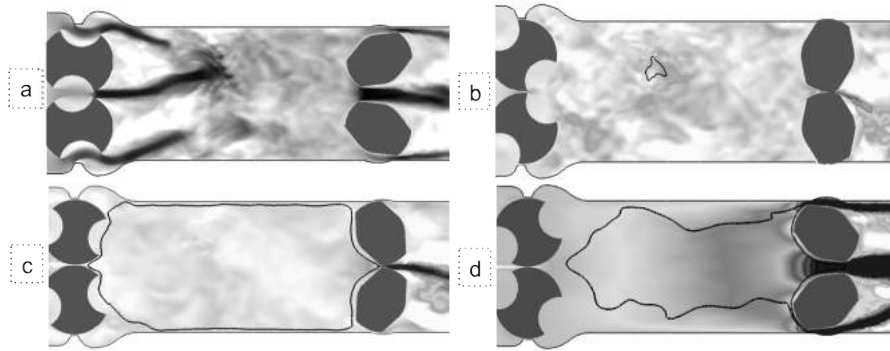


Figure 7: OP2 - LES results: flame position (isolevel of temperature: $T = 1800\text{K}$) superimposed to the axial velocity field (velocity magnitude from 0 to 100 m/s). (a) Intake ($\theta = 82^\circ$). (b) Ignition ($\theta = 125^\circ$). (c) End of combustion phase ($\theta = 171^\circ$). (d) Exhaust ($\theta = 13^\circ$).

265 to cycle variations. Figure 7 displays velocity fields and flame position for one cycle for OP2. Instants *a*, *b*, *c* and *d* (Fig. 7) correspond respectively to the

moment of maximum velocity at intake (*a*), 0.5 ms after spark timing (*b*), the
 end of combustion phase (*c*), and the moment of maximum velocity during the
 exhaust phase (*d*). The velocity decay after the inlet valves close is especially
 270 clear between instants (*a*) and (*b*): the maximum velocity at inlet (*a*) is 440 m/s
 but it has already decayed to 30 m/s at spark timing in Fig. 7b. Combustion
 is fast for this cycle: 90% of the fuel is burned in less than 50 degrees between
 instants (*b*) and (*c*). Moreover, like in piston engines, some fresh gases remain
 trapped between the walls and the flame front: they become visible in Fig. 7d
 275 when the pressure decreases during the exhaust phase.

LES also revealed significant cyclic variations: pressure curves (Fig. 8) for
 the 25 cycles computed with LES fall within the range of experimental data.
 The maximum normalized pressure P_{cc}/P_{air} reached in the LES varies from 2.7
 to 4.5 for cycles which burn but like in the experiment certain cycles do not
 280 burn at all.

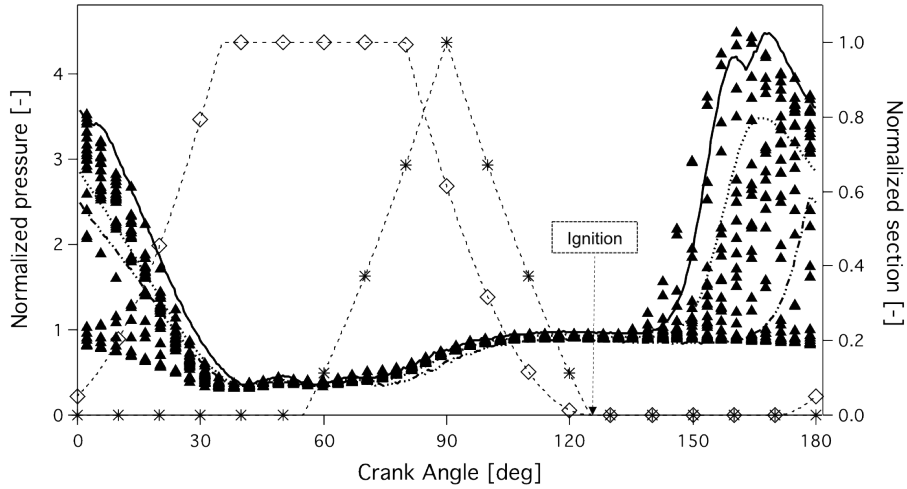


Figure 8: LES (individual cycles) and experimental (envelope) results for reacting case OP2 - Pressure evolution as a function of cycle angle for 25 consecutive cycles. ($\blacktriangle$) LES pressure in the combustion chamber. (—) Experimental maximum pressure in the combustion chamber. (---) Experimental minimal pressure in the combustion chamber. (.....) Experimental mean pressure in the combustion chamber. (*) Intake section. ($\diamond$) Exhaust section.

Experimental results suggest that the cyclic variations observed in Fig. 8 are mostly linked to the initial conditions of individual cycles in terms of velocity field and mixture composition. For example, the flame kernel created after spark ignition is subject to a high variability (Fig. 9): 10° after ignition, the kernel position is moved by more than 2 cm between two cycles. The left image of Fig. 9 shows a flame which propagates to the right side of the chamber while the right one reveals a flame going left. The reasons which can lead to such variability can be investigated using LES data where two explanations were tested:

- velocity fluctuations near the spark
- residuals and local mixing fluctuations

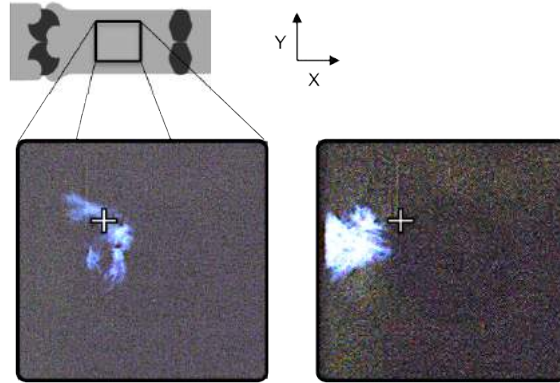


Figure 9: OP2 - Flame kernel variability between two experimental cycles $\theta = 135^\circ$. The + sign indicates the spark position.

Influence of velocity fluctuations

Figure 10 displays the absolute velocity at the spark location versus crank angle for all LES cycles. The variability is obvious even before sparking: variations of 10 to 40 m/s are observed between individual cycles. This is clearly a possible source of cyclic variations. It can be checked by plotting scatter graphs

of the maximum cycle pressure versus local velocity at spark timing near the spark. Figure 11 shows that a correlation exists between these quantities: the maximum pressure of a given cycle goes down when the flow velocity at spark timing increases.

300 timing increases.

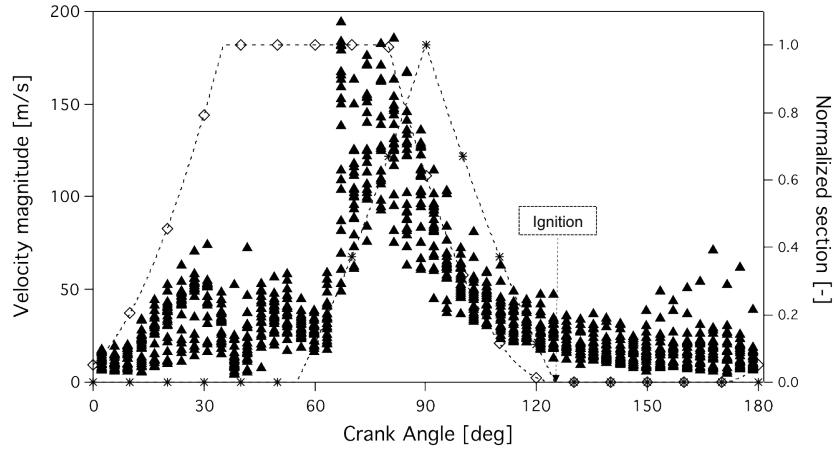


Figure 10: OP2 - (▲) Evolution of the velocity magnitude at the spark location (averaged over a sphere of 1cm radius) versus cycle angle. (*) Intake section. (◇) Exhaust section.

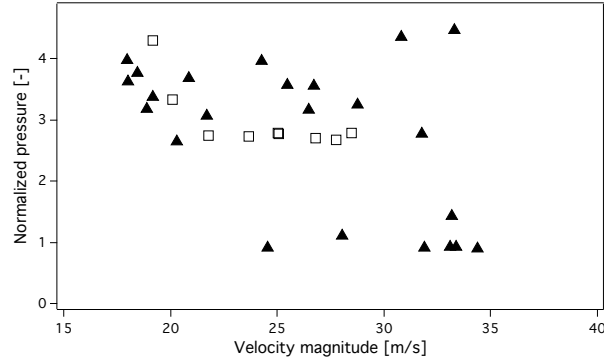


Figure 11: OP2 - Maximum pressure versus LES velocity magnitude. (▲) LES magnitude of the velocity at the spark location (averaged over a sphere of 1cm radius). (□) LES magnitude of the velocity averaged over the full chamber.

To investigate the relationship between velocity at spark timing ($\theta = 125^\circ$)

and maximum pressure, three consecutive cycles (C9, C10, and C11) are compared in Fig. 12 at two crank angles: $\theta = 129^\circ$ (4° after spark timing) and $\theta = 139^\circ$ (10° later). The comparison reveals different behaviors in terms of peak pressure (Fig. 13) and turbulence flow at spark timing (Fig. 14). Cycle C9 is igniting and propagating very rapidly in the whole chamber. Cycle C10 on the other hand is totally quenched and will lead to misfire. Cycle C11 is late compared to C9 but finally burns as indicated by its maximum normalized pressure of 3.5 (Fig. 13).

The C9 cycle begins with a low velocity in the spark region (Fig. 14) and experiences a fast combustion process. For cycle C10, a residual tumble motion at spark timing (Fig. 12) leads to a high level of turbulence at spark location (Fig. 14) which prevents the kernel to develop and finally leads to a total misfire as seen in the middle image of Fig. 12. This analysis shows the influence of turbulence at spark timing on the flame propagation: for cycles with a high velocity at spark timing, the initial flame kernel is quenched and the flame can not propagate in the chamber; cycles which start in a lower turbulence activity result in higher pressures.

Up to now, the analysis has focused on correlations between the performance of one cycle and the flow characteristics at the beginning of the same cycle. LES reveals however that cycle (N+1) actually depends strongly on cycle N. For example, an intense combustion cycle like C9 generates an intense turbulence during the exhaust phase, and a high velocity at spark timing for the next cycle (C10) indicating a possible oscillatory mechanism between consecutive cycles. Figure 15 displays the absolute velocity (averaged over the chamber) at spark timing for cycle (N+1) versus the maximum pressure of the previous cycle N: cycles with an intense combustion (high maximum pressure) appear to cause high velocities for the next cycle. To determine whether cycle N influences the combustion process of cycle (N+1) (Fig. 16), the maximum pressure reached during cycle (N+1) is plotted versus the maximum pressure of the previous cycle N. This is done for both experimental and LES results in Fig. 17, which shows that an intense high pressure cycle is often followed by a low pressure

cycle. Cycles are not independent and Fig. 17 actually reveals two families of cycles:

- 335 • stable cycles where cycles burning normally follow each other: both maximum pressure reached during cycle N and maximum pressure reached during cycle (N+1) are high.
- unstable cycles, either weak or strong, where a strongly burning cycle N leads to a weakly burning cycle (N+1) and vice versa.

340 This situation differs from cyclic variations in piston engines which are mainly due to random velocity excursions and no coupling appears between consecutive cycles [8, 44, 45]. The main reason for this is the absence of compression phase in the CVC chamber: this phase dissipates turbulence in piston engines very strongly and contributes to isolate cycles from each other. It does
 345 not exist in a CVC chamber.

Influence of residuals

The previous results show that the turbulent fluctuations at the spark location control the combustion of cycle N and therefore the efficiency of cycle
 350 (N+1): for example, a low velocity at the spark (cycle C9) leads to intense combustion and a slow following cycle (C10, Figs. 13 and 14). This instability mechanism is not observed for all cycles as seen in Fig. 17 but it controls more than half of them. This section suggests that the amount of residuals left after each cycle contributes to the oscillation between consecutive cycles.

355 The effect of residuals was investigated by studying scatterplots of the maximum pressure in the chamber versus the percentage (mass fraction) of burned gases left in the chamber at spark timing ($\theta = 125^\circ$). This quantity measures the residual gases left in the chamber after the exhaust and intake phases. Figure 18 shows that the lowest residual mass fractions at spark timing lead to the
 360 highest maximum pressure. Moreover, if cycle N burns efficiently, it leads to

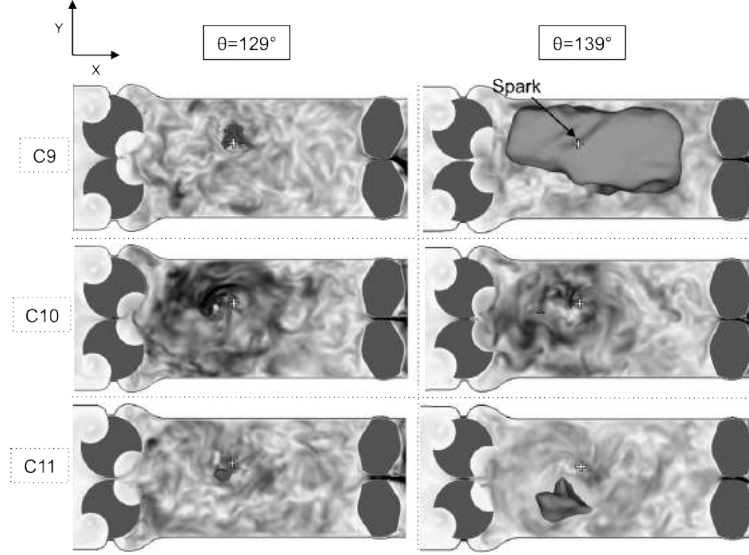


Figure 12: OP2 - Comparison of the flame propagation (isurface of temperature: $T = 1800\text{K}$) between three cycles (C9 C10 C11) superimposed to the field of velocity (velocity magnitude from 0 to 60 m/s) Left: $\theta = 129^\circ$. Right: $\theta = 139^\circ$.

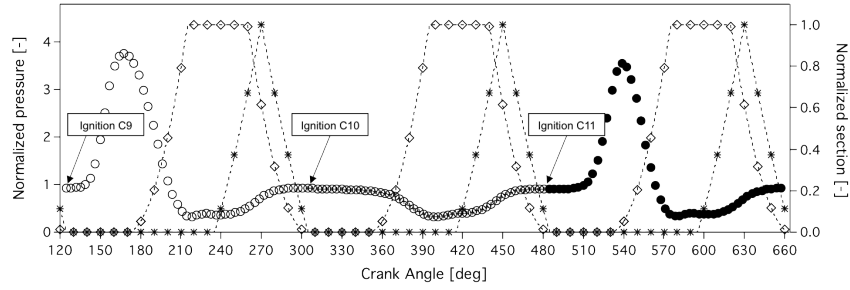


Figure 13: OP2 - Pressure evolution versus cycle angle for the three cycles C9, C10 and C11. ($\circ$) C9. ($\oplus$) C10. ($\bullet$) C11. ($*$) Intake section. ($\diamond$) Exhaust section.

a high maximum pressure but also to complete combustion and therefore to a high level of residuals when the following cycle begins (Fig. 19).

Figure 20 shows the same analysis where the global residual mass fraction is replaced by the local residual mass fraction averaged over a sphere of 1cm radius around the spark location. The same trend is observed: cycles which

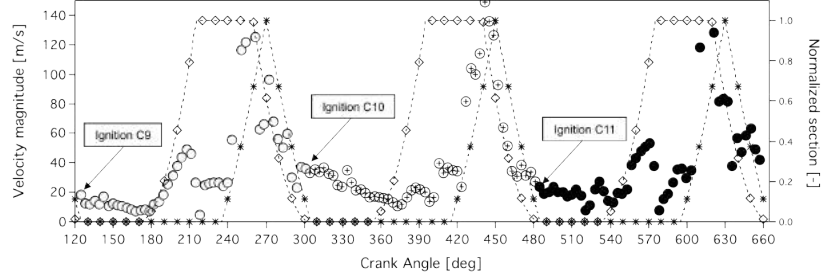


Figure 14: OP2 - Evolution of the velocity magnitude at the spark location versus cycle angle for the three cycles C9, C10 and C11. ($\circ$) C9. ($\oplus$) C10. ($\bullet$) C11. ($*$) Intake section. ($\diamond$) Exhaust section.

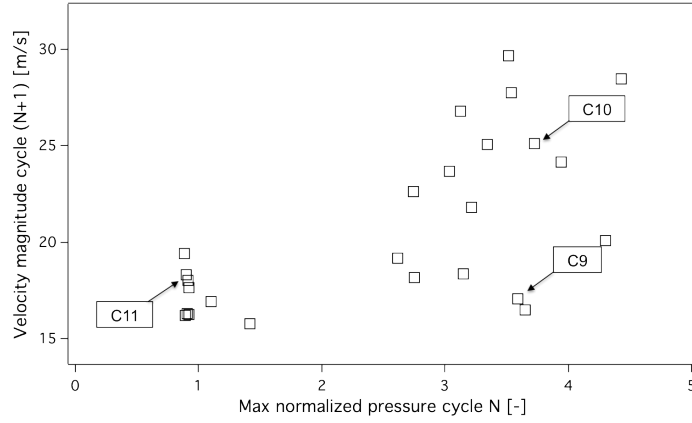


Figure 15: OP2 - Evolution of the velocity magnitude averaged over the chamber for cycle (N+1) versus maximum pressure for cycle N. Example: the C9 point coordinates are (maximum pressure of cycle C8, velocity magnitude of cycle C9).

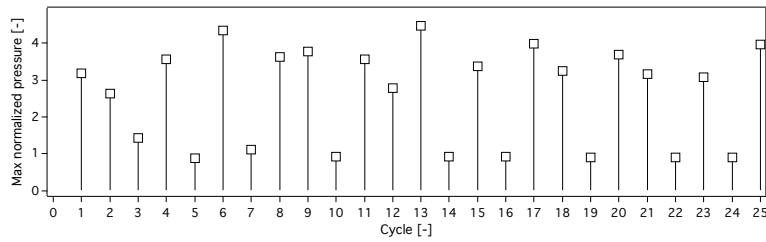


Figure 16: OP2 - Maximum pressure for each LES cycle.

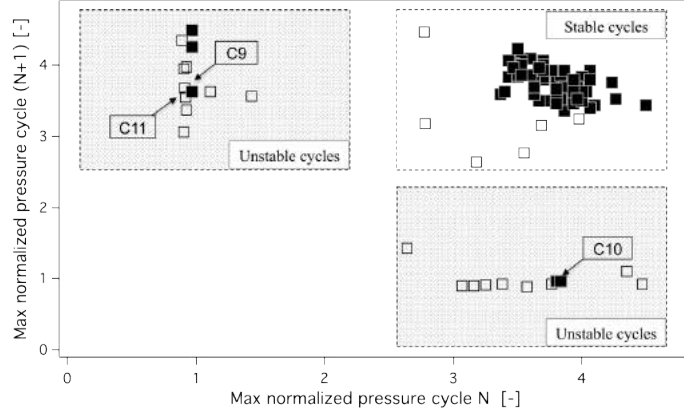


Figure 17: OP2 - Maximum pressure for cycle (N+1) versus maximum pressure for cycle N. (□) LES results. (■) Experimental results.

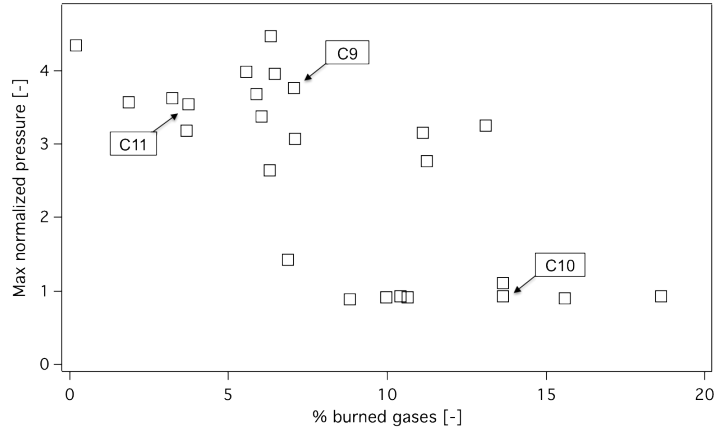


Figure 18: OP2 - Maximum pressure versus percentage of residual burned gases in the chamber.

begin with a high level of residuals, either near the spark (Fig. 20) or globally in the chamber (Fig. 18), lead to lower maximum pressures.

At this point, it is difficult to separate the effects of the velocity at spark location (Fig. 11) and of the residual mass fraction (Fig. 20). A high velocity
 370 at the spark or a high residual mass fraction at the beginning of a cycle both lead to a low maximum pressure. To clarify this point, another operating point

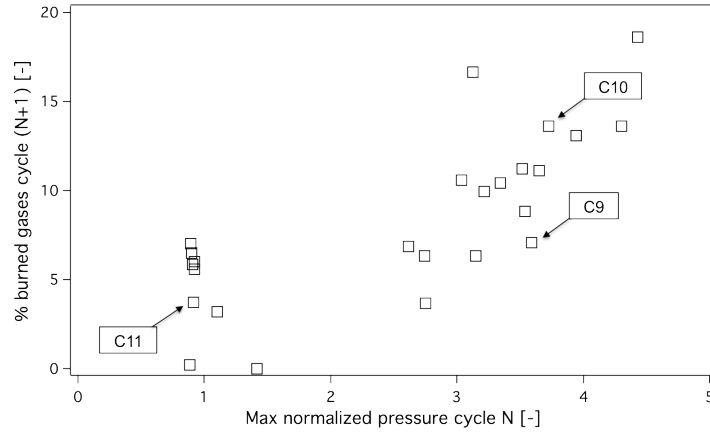


Figure 19: OP2 - Percentage of residual burned gases in the chamber for cycle (N+1) versus maximum pressure for cycle N. Example: the C9 point coordinates are (maximum pressure of cycle C8, percentage of burned gases of cycle C9).

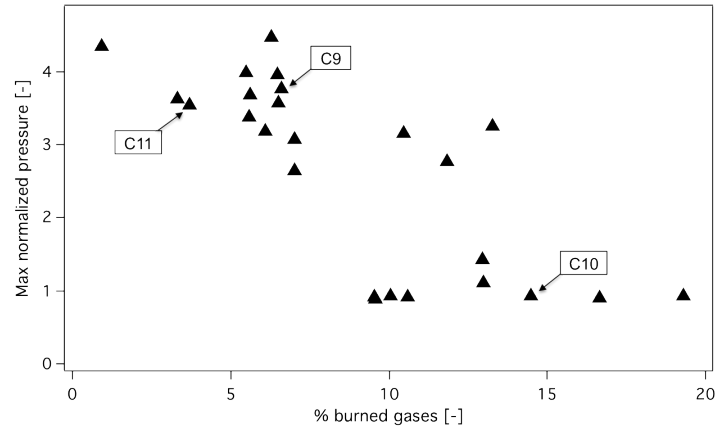


Figure 20: OP2 - Maximum pressure versus percentage of residual burned gases at spark location (averaged over a sphere of 1cm radius).

(OP3) is computed in the next section at a higher rotation speed.

6. Analysis of reacting CVC point OP3 (1500 rpm)

The previous section has shown that both turbulent velocity fluctuations and residuals played a role on cyclic fluctuations. To distinguish between these two mechanisms, a second point was studied where the rotation speed was set to 1500 rpm to increase velocities. Except for the rotation speed, the reacting point OP3 corresponds to the same conditions as OP2 (Tables 3 and 5).

As expected, the larger rotation speed of OP3 leads to larger velocities at the spark and in the chamber (Fig. 21) compared to OP2 (Fig. 10). This has a direct impact on combustion for OP3: experiments show a high level of misfires and nearly 50% of the cycles do not burn (Fig. 22). LES reveals an almost similar behavior (Fig. 23) where 60% of the cycles do not burn.

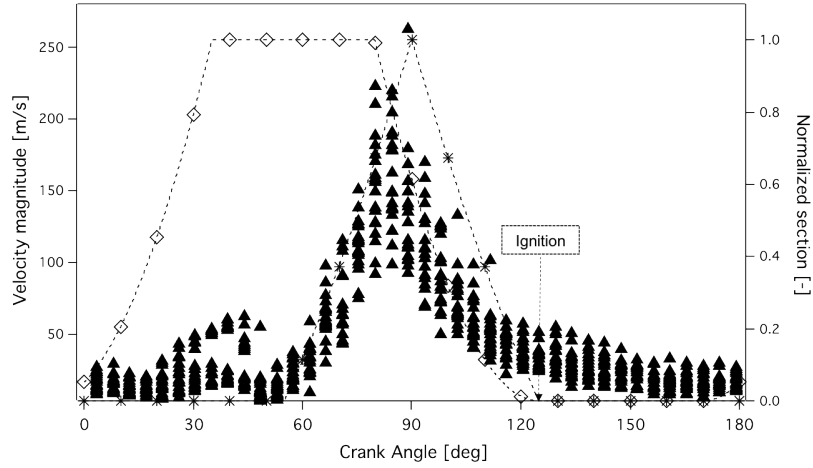


Figure 21: OP3 - (▲) Evolution of the velocity magnitude at the spark location (averaged over a sphere of 1cm radius) versus cycle angle. (*) Intake section. (◇) Exhaust section.

The analysis of pressure maxima in LES and experimental data shows that one successful cycle N almost always leads to a misfire for cycle (N+1) (Fig. 24). Moreover, a second class of stable cycles appear: stable cycles for OP3 correspond to consecutive misfires showing that multiple misfires can occur successively as observed in Fig. 22 (for the experiment) or in Fig. 23 (for the LES). For this case, the scenario of instability is simpler than for OP2:

- a successful N cycle leads in all cases to a high turbulent velocity at the spark for cycle (N+1) (Fig. 25).
- a cycle (N+1) with a large velocity (> 33 m/s) at spark timing never burns (Fig. 26). This result is observed in LES as well as in experimental data. Experimental measurements of velocity at spark location confirm that the misfire probability (50% experimentally) is linked to a high velocity level (29 m/s). This critical velocity observed experimentally is the same order of the velocity threshold (33 m/s) evidenced by LES for OP3.

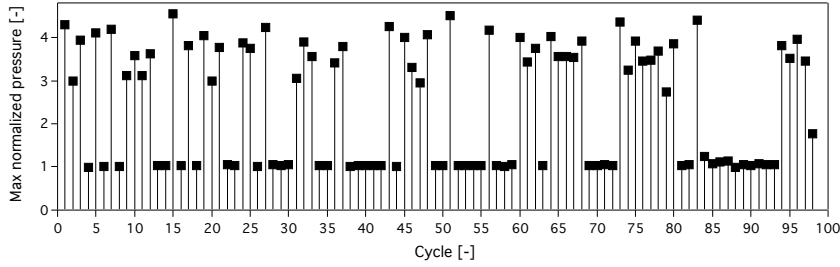


Figure 22: OP3 - Maximum pressure for consecutive experimental cycles.

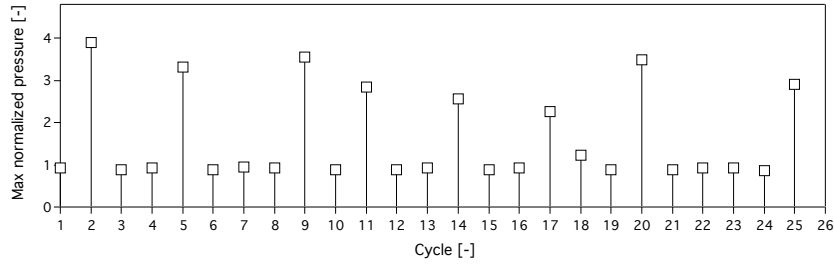


Figure 23: OP3 - Maximum pressure for consecutive LES cycles.

This scenario explains why a cycle N with strong combustion leads to a misfire of cycle (N+1). Vice versa, cycles which do not burn lead to a decay of the velocity in the chamber and at the spark (Fig. 25) so that combustion can eventually be successful again. Figure 26 displays the evolution of the maximum normalized pressure versus the velocity magnitude at the spark or in the whole

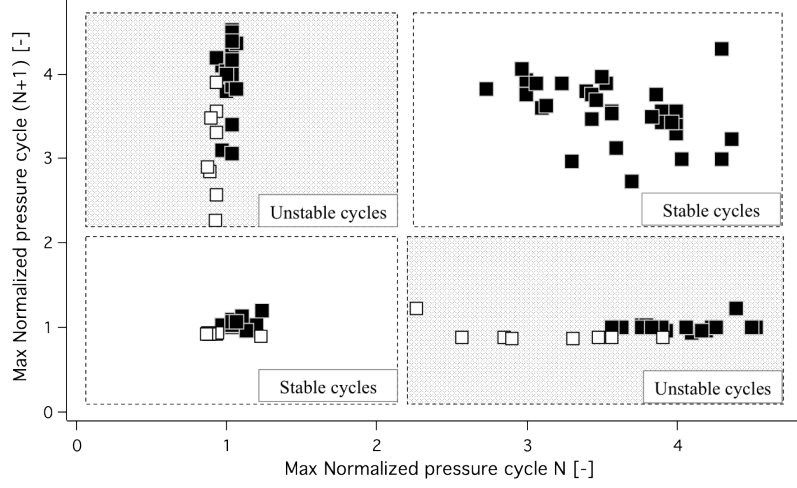


Figure 24: OP3 - Maximum pressure for cycle (N+1) versus maximum pressure for cycle N.
 (□) LES results. (■) Experimental results.

chamber (the same trend is observed for both quantities): when the velocity at the spark is more than 33 m/s, the cycle systematically leads to a misfire. This result can be corroborated by studies of ignition in a constant velocity flow [46] or in a turbulent flow [39] showing that for a given equivalence ratio and a given ignitor, ignition fails when the flow velocity (normalized by the flame speed) at the spark exceeds a certain threshold. Here, despite the large ignition energies used experimentally, the velocities at the spark are high enough to lead to misfires. No attempt was made to correlate the critical velocities (u/s_L) needed for misfires to the spark energy because the spark was the same for almost all cases, but this would be the next work direction.

When the velocity at the spark is larger than the critical value observed for this case (33 m/s), most ignition sequences follow the scenario visualized in Fig. 27: the initial flame kernel is formed by the spark (Fig. 27a), it begins to propagate (Fig. 27b) but it is rapidly diffused (Fig. 27c) so that the flame propagation is totally stopped (Fig. 27d). Ignition takes place but it creates a kernel which is too weak to propagate in the turbulent flow.

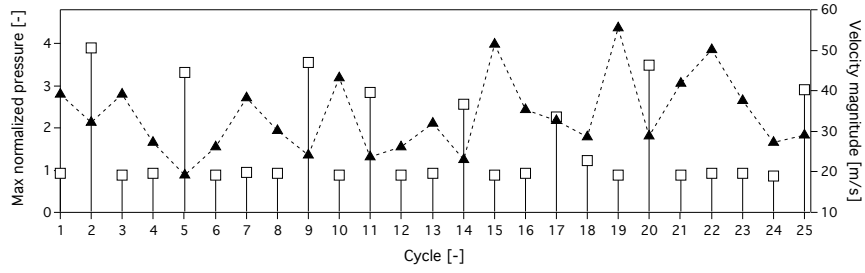


Figure 25: OP3 - Influence of cycle N on the velocity magnitude of cycle (N+1). (□) Maximum pressure for each LES cycle. (▲) LES magnitude of the velocity at spark timing at the plug (averaged over a sphere of 1cm radius).

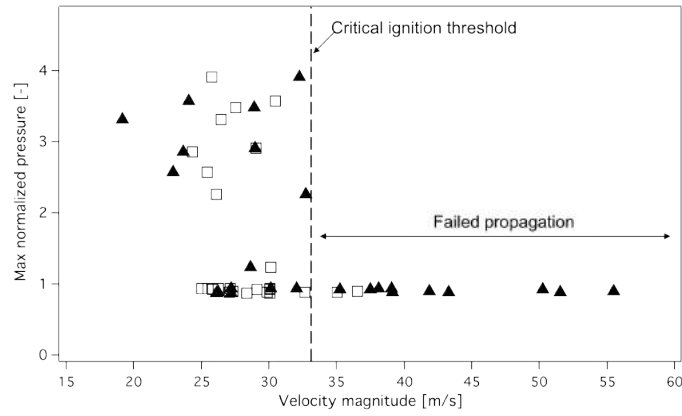


Figure 26: OP3 - Maximum pressure versus LES velocity magnitude. (▲) LES magnitude of the velocity at the spark location (averaged over a sphere of 1cm radius). (□) LES magnitude of the velocity averaged over the chamber.

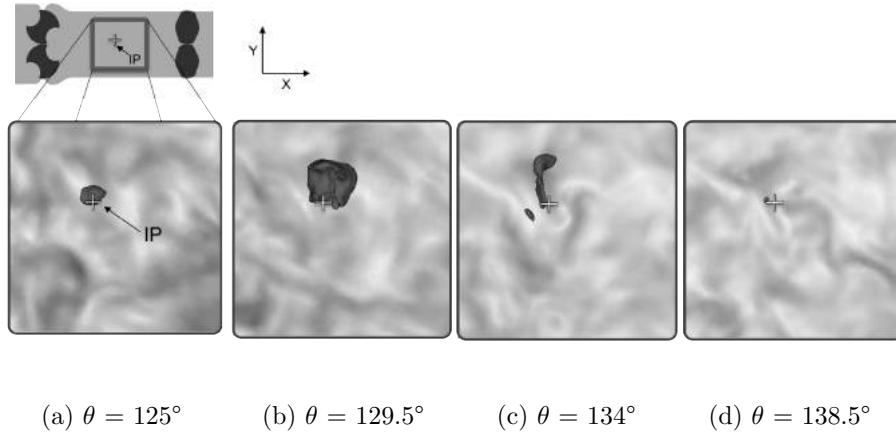


Figure 27: OP3 - LES results: flame position (isosurface of temperature: $T = 1800\text{K}$) superimposed to the field of axial velocity (velocity magnitude from 0 to 100 m/s) 1mm in front of the chamber wall. IP indicates the point where the spark is produced.

7. Conclusion

420 This paper presents a comparison between LES and experiments for a non-reacting operating point (OP1) and two unstable fired operating points (OP2 and OP3) in a new concept of constant volume combustion (CVC) engine. The comparison includes flame front positions, pressure signals in the intake carburation chamber and within the combustion chamber. The comparison of LES
425 and experiments shows that:

- LES is able to reproduce the volumetric efficiency observed in the CVC engine for the non-reacting operating point (OP1), showing that the fluid dynamics is correctly captured.
- LES captures the cycle-to-cycle variations observed with combustion for
430 two operating points (OP2 and OP3).

A detailed investigation of the sources of cyclic variability reveals that a cycle which burns efficiently leads to a high velocity for the following cycle. If this velocity is larger than 33 m/s (for the present conditions), the following cycle will misfire. This happens rarely in OP2 at 1200 rpm but more often for
435 OP3 at 1500 rpm. These results show that unlike piston engine flows, CVC flows exhibit cyclic instabilities where combustion in cycle N directly controls cycle (N+1). This is probably due to the fact that there is no compression phase in the CVC system: ignition occurs right after intake where the flow still has a direct memory of the previous cycle. Future studies should concentrate
440 on more sophisticated methods for cyclic variation analysis [45] but also on the definition of CVC configurations where these instabilities are totally eliminated.

8. Acknowledgments

The support of DGA, COMAT and TURBOMECA is gratefully acknowledged, as well as Stephane Lamory for his participation during experiments at
445 PPRIME.