



Numéro d'ordre : 2013ECAP0011

ÉCOLE CENTRALE DES ARTS ET MANUFACTURES
« ÉCOLE CENTRALE PARIS »

THÈSE

présentée pour l'obtention du grade de

DOCTEUR

Spécialité : Énergétique

Laboratoires d'accueil : IFPEN / EM2C

par

Julien TILLOU

**DÉVELOPPEMENT D'UNE MODÉLISATION BASÉE SUR
LA TABULATION DE SCHÉMAS CINÉTIQUES COMPLEXES
POUR LA SIMULATION AUX GRANDES ÉCHELLES
DE L'AUTO-INFLAMMATION ET
DE LA COMBUSTION TURBULENTE NON-PRÉMÉLANGÉE
DANS LES MOTEURS À PISTONS**

Soutenance prévue le 29 janvier 2013 devant le jury composé de :

Bénédicte CUENOT	Chercheur senior CERFACS	Rapporteur
Pascale DOMINGO	Directrice de recherche CNRS	Rapporteur
Denis VEYNANTE	Directeur de recherche CNRS	Directeur de thèse
Marc BELLENOUE	Professeur ENSMA	Examineur
Benoît ENAUX	Ingénieur PSA Peugeot Citroën	Examineur
Christian ANGELBERGER	Expert combustion IFPEN	Examineur
Jean-Baptiste MICHEL	Ingénieur de recherche IFPEN	Invité

Remerciements

Cette expérience de thèse s'est révélée à la fois intense et enrichissante. Au cours de ces trois années se sont succédés les échecs et les réussites. Ma dernière tâche consiste à remercier toutes les personnes sans lesquelles cette expérience ne se serait pas chargée de tout son sens. La rédaction de ces remerciements vient clore ma thèse et avec elle un chapitre de ma vie, et c'est avec nostalgie que je m'y attèle.

Mes premiers mots de remerciement vont à mes encadrants de thèse, Denis Veynante de l'école Centrale Paris et Christian Angelberger d'IFP Energies Nouvelles, dont les conseils et l'expérience m'ont permis d'avancer durant ces trois ans. Merci Denis pour tes conseils toujours très avisés. Merci Christian pour ta disponibilité, ton soutien et ta patience (cf. 1^{ere} publi!). Les discussions dans ton bureau permettaient toujours de recharger les batteries et de trouver de nouvelles motivations dans ce *marathon* de trois ans.

Je souhaiterais ensuite remercier les membres de mon jury de thèse pour avoir accepté d'évaluer mon travail, pour leurs questions et leurs remarques toujours pertinentes. Merci à messieurs Bellenoue et Eaux pour leur implication et à mesdames Cuénot et Domingo pour avoir pris le temps de relire mon manuscrit dans les détails et pour avoir rédigé les rapports.

Ayant effectué ma thèse dans le département modélisation et simulation systèmes, je suis reconnaissant à Antonio Pires da Cruz ainsi qu'à tous les ingénieurs de ce département pour m'avoir accueilli dans les meilleurs conditions. Je voudrais remercier plus particulièrement Lionel Martinez, l'homme de la situation pour le diphasique, ainsi que Nicolas Gillet et Anthony Velghe auxquels j'accorde le titre bien mérité de dieux du compilo.

Ce périple de trois ans restera pour moi un excellent souvenir, en particulier grâce à l'interaction avec les autres thésards. Merci tout d'abord aux anciens et en particulier Yohan, Guillaume, Sabre et Hubert. Merci à Aymeric pour m'avoir initié à l'art de la programmation (et surtout du debugging) dans AVBP. Merci aussi à Pauline pour sa finesse à toute épreuve (je suis ici obligé de rementionner Aymeric, toujours très réactif et inventif sur ce point). Au rythme des soutenances, les anciens sont partis vers d'autres horizons et j'ai doucement été amené à prendre leur place. Mon quotidien s'est tissé autour de mes nouveaux compagnons de route et en particulier ceux du bureau CB 309 (the place to be!) : Anthony (c'te sudiste), Stéphane (EP avec tout ce que cela



implique...), Carlo (Ma qué...) et JB (qui a mérité sa place parmi nous au prix de débats sur des sujets aussi variés que les guerres napoléoniennes, la puissance de l'armée allemande ou encore le combat de cerfs à main nus). Je n'aurai pu espérer meilleur ambiance. Merci aussi aux autres thésards : Haifa, Betty, Oguz, Bejoy, Damien, Stravos, Sullivan, Adam, Nicolas et bon courage pour la suite. At last I would like to thank Cemil Bekdemir from TU Eindhoven for our fruitful collaboration.

J'aimerais aussi remercier mes amis, extérieurs à cette thèse. De Bastille à Oberkampf en passant par un certain "James Hetfeeld's Pub", ils m'ont permis d'oublier les tracas du doctorat (voir un peu plus).

Ces remerciements ne seraient pas complets sans parler de Jean-Baptiste Michel, co-encadrant de ma thèse à IFP Energies Nouvelles, dont les différents surnoms - Michou, le grand bête, le dernier des thésards, le gourou - permettent (ou pas) de broser une esquisse. Malgré une insistance particulièrement marquée pour l'obtention à moindre frais de ma moto au titre d'obscur "frais d'encadrement", ce personnage haut en couleur s'est avéré essentiel à la réalisation de ces travaux de thèse. Il m'a non seulement fait partager ses excellentes compétences techniques mais s'est aussi montré humainement indispensable dans les moments difficiles. Peut-être finira-t-il par l'avoir cette moto !

Enfin, il convient de parler d'une certaine Charlotte Lascault, rencontrée au cours de cette aventure de thèse (Loft ou Ben's café ???). Cette charmante institutrice s'est fortement investie dans ce travail de thèse, allant jusqu'à se renseigner sur le fonctionnement du moteur Diesel ou encore remettant à niveau ma formation en français. Ce dernier point a, je pense, constitué un vrai soulagement pour Jean-Baptiste et Christian. Nul doute que s'ils pouvaient la remercier ici, ils le feraient ! Charlotte m'a de plus soutenu tout au long de ces travaux de thèse et en particulier dans la phase très "monacale" (ses propres mots...) du dernier mois de rédaction. Chapeau !

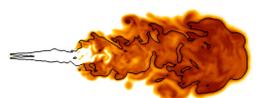


Résumé

Dans un contexte où les questions environnementales et énergétiques ont une importance capitale, les constructeurs automobiles sont fortement poussés à développer des moteurs à combustion interne toujours plus économes et moins polluants. Pour le développement de procédés de combustion innovants et l'amélioration de leur compréhension, la simulation aux grandes échelles apparaît comme un outil prometteur. Ce travail de thèse traite du développement et de la validation d'un modèle pour la simulation aux grandes échelles de la combustion Diesel. Le modèle ADF-PCM, basé sur la tabulation de flammes de diffusion approchées auto-inflammantes étirées et permettant la prise en compte d'une cinétique chimique détaillée, est utilisé dans ces travaux.

Le modèle ADF est tout d'abord introduit. Il permet d'approximer des flammes de diffusion laminaires à partir de flammelettes dont les termes chimiques proviennent de calculs de réacteurs homogènes. La première étape de ces travaux consiste à valider ces flammes de diffusion approchées dans des configurations proches de celles observées dans les moteurs Diesel. Le modèle ADF-PCM, initialement développé dans un formalisme RANS, est ensuite étendu à un formalisme LES pour des écoulements diphasiques et intégré dans le code LES compressible AVBP. Un modèle de stratification en température ainsi que les termes de couplage avec la phase liquide décrite par un formalisme Eulérien sont développés. Le modèle ADF-PCM est ensuite validé sur deux expériences de sprays Diesel en enceinte fermée. Il permet une bonne reproduction des résultats expérimentaux en termes de délai d'auto-inflammation, de dégagement de chaleur et de hauteur d'accrochage de la flamme. Les prédictions du modèle ADF-PCM sont ensuite comparées avec celles d'autres modèles faisant différentes hypothèses simplificatrices par rapport à la structure de flamme et la stratification en sous-maille de la fraction de mélange. Les résultats obtenus à l'aide de ces différents modèles soulignent la nécessité de la prise en compte de ces effets, même pour des résolutions spatiales fines. Finalement, des comparaisons entre les résultats expérimentaux et la simulation sont réalisées avec le modèle ADF-PCM pour différents taux de gaz recirculants. Celui-ci montre une reproduction qualitative de l'effet des gaz recirculants sur la combustion.

Mots clés : Simulation aux grandes échelles, LES, chimie tabulée, combustion turbulente, combustion non-prémélangée, modélisation de flammelette, auto-inflammation, combustion Diesel.

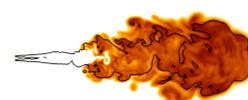


Abstract

In a context where environmental and energetic issues are of major importance, car manufacturer are pushed toward developing more and more efficient vehicle with less pollutant emissions. To develop new combustion processes and improve their understanding, Large-Eddy Simulation appears as a promising tool. This thesis deals with the development and the validation of a model for Large-Eddy Simulation of Diesel combustion. The ADF-PCM model, based on the tabulation of strained approximated diffusion flames which allow to take into account detailed chemical schemes, is used.

First, the ADF model is introduced. It approximates laminar diffusion flames by flamelets for which the chemical terms are extracted from a look-up table based on homogeneous reactors. The first step of this work consists in the validation of these approximated diffusion flames in Diesel conditions. The ADF-PCM model, initially formulated in a RANS formalism is extended to Large-Eddy Simulation of two phase flows and implemented in the AVBP LES compressible solver. A temperature stratification model is developed, as well as coupling terms for the liquid phase described by an Eulerian formalism. The ADF-PCM model is then assessed and validated on two experiments of Diesel liquid sprays injected into a constant volume chambers. It accurately predicts experimental findings in terms of auto-ignition delay, heat release rate and lift-off length. ADF-PCM results are then compared with those of other models considering different simplifying assumptions concerning flame structure or subgrid-scale mixture fraction stratification. The results indicate the necessity to consider these effects, even for fine grids. Finally, the capacity of the ADF-PCM approach to reproduce the influence of exhaust gas recirculation over combustion is assessed. Comparisons between experimental and simulation results indicate a qualitative reproduction of exhaust gas recirculation impact over combustion.

Keywords : Large-Eddy Simulation, LES, tabulated chemistry, turbulent combustion, non-premixed combustion, flamelet modeling, auto-ignition, Diesel combustion.



Nomenclature

Abréviations

ADF	: Approximated Diffusion Flame
CFD	: Computational Fluid Dynamics
CMC	: Conditional Moment Closure
DITurBC	: Downstream Inflow Turbulent Boundary Condition
DNS	: Direct Numerical Simulation
ECFM3Z	: 3-Zones Extended Coherent Flame Model
EGR	: Exhaust Gas Recirculation
FGM	: Flamelet Generated Manifold
FPI	: Flamelet Prolongation of ILDM
FPV	: Flamelet Progress Variable
HCCI	: Homogeneous Charge Compression Ignition
ILDM	: Intrinsic Low Dimensional Manifold
ISAT	: In Situ Adaptation Tabulation
LES	: Large-Eddy Simulation
NORA	: NO Relaxation Approach
NS	: Navier-Stokes
PCM	: Presumed Conditional Moment
PDF	: Probability Density Function
pHCCI	: Partially Homogeneous Charge Compression Ignition
PMB	: Point Mort Bas
PMH	: Point Mort Haut
RANS	: Reynolds Averaged Navier-Stokes
RH	: Réacteur homogène
RIF	: Representative Interactive Flamelet
RMS	: Root Mean Square
RUE	: Random Uncorrelated Energy
RUM	: Random Uncorrelated Motion
S2FT	: Self Similar Flame Tabulation
SGS	: Subgrid-Scale
TKI	: Tabulated Kinetics of Ignition
TPF	: Two Phase Flow
UFPV	: Unsteady Flamelet Progress Variable
VVTHC	: Variable Volume Tabulated Homogeneous Chemistry



Notations Grèques

α	: Fraction volumique
α_m	: Fraction volumique maximale
δ	: Fonction de Dirac
δ_c	: Incrément de la variable d'avancement
δ_{ij}	: Symbole de Kronecker
δu_p^b	: Vitesse décorrélée de la particule b
δK	: Tenseur des corrélations triples du mouvement non corrélé.
δR	: Tenseur des corrélations doubles du mouvement non corrélé.
$\delta \Sigma$: Tenseur de déformation liquide.
$\delta \theta$: Tenseur d'énergie décorrélée
Δ	: Taille caractéristique de filtre
Γ	: Terme d'évaporation du liquide
κ_{RUM}	: Coefficient de diffusion du mouvement décorrélé
λ	: Coefficient de conductivité thermique
Λ	: Echange d'enthalpie sensible par évaporation
μ	: Viscosité moléculaire dynamique
ν	: Viscosité moléculaire cinématique
ν_{RUM}	: Viscosité du mouvement décorrélé
ξ	: Bulk viscosity
Ξ_{exact}	: Terme diffusif d'une flammelette
Ξ_{ADF}	: Terme diffusif approché
$\Pi_{\delta\theta}$: Terme de production du RUE par les échelles de sous-maille
ρ	: Densité
τ	: Tenseur des contraintes visqueuses
τ_c	: Temps caractéristique des collisions
τ_p	: Temps de Stokes caractéristique
τ_r	: Temps de relaxation
τ^t	: Transport convectif de sous-maille
Φ	: Terme d'échange thermique à l'interface liquide par conduction
χ	: Dissipation scalaire
$\dot{\omega}_k$: Taux de réaction de l'espèce k
$\dot{\omega}_T$: Terme source d'énergie

Notations Latines

a	: Etirement
B_M	: Nombre de Spalding
c	: Variable de progrès normalisée
C_D	: Coefficient de traînée
C_p	: Capacité calorifique du mélange à pression constante
C_s	: Constante du modèle de Smagorinsky
d	: Diamètre d'une goutte
D	: Coefficient de diffusion moléculaire
Da	: Nombre de Damköhler
e	: Coefficient d'inélasticité
E	: Énergie totale non chimique
erf	: Fonction d'erreur de Gauss
F_{drag}	: Force de traînée
g_0	: Fonction de distribution radiale
G	: Fonction filtre
h_f^0	: Enthalpie de formation à la température de référence de 298K
h_s	: Enthalpie sensible
J	: Flux diffusif des espèces
J^t	: Terme convectif de sous-maille des espèces
k_{SGS}	: Energie cinétique de la turbulence en sous-maille
Nu	: Nombre de Nusselt
n_l	: Densité en nombre de particules
p	: Pression
Pr	: Nombre de Prandtl
q	: Flux diffusif d'énergie
Q	: Critère de Pope
q^t	: Flux convectif d'énergie en sous-maille
Re	: Nombre de Reynolds
Re_p	: Nombre de Reynolds de la particule
S	: Tenseur des contraintes
Sc	: Nombre de Schmidt
Sh	: Nombre de Sherwood
S_z	: Ségrégation de la fraction de mélange
t	: Temps
T	: Température
\mathbb{T}	: Tenseur de contrainte de sous-maille pour la phase liquide
u	: Vitesse



$u_p^{(b)}$: Vitesse de la particule b
V	: Vitesse de diffusion
W	: Masse molaire
x	: Coordonné spatiale
X	: Fraction molaire
Y	: Fraction massique
Z	: Fraction de mélange

Indices

i	: Axe du repère
g	: Phase gazeuse aussi appelée phase porteuse
l	: Phase liquide aussi appelée phase dispersée
mr	: Most reactive
k	: Indice de l'espèce considérée
ζ	: interface liquide

Exposants

$coll$: Terme collisionnel
RES	: Terme résolu
t	: Terme turbulent
tot	: Terme total (cinématique + collisionnel)
τ	: Filtrage LES au sens de Reynolds
$\tilde{\cdot}$: Filtrage LES au sens de Favre pour la phase gazeuse
$\hat{\cdot}$: Filtrage LES au sens de Favre pour la phase liquide

Table des matières

1	Introduction	19
1.1	Rôle de la simulation dans les moteurs	20
1.2	Caractéristiques de la motorisation Diesel	22
1.3	Simulation tridimensionnelle de moteurs Diesel	25
1.4	Objectifs du présent travail	26
1.5	Organisation du manuscrit	27
2	Étude bibliographique de la simulation aux grandes échelles de moteurs Diesel	29
2.1	Principaux modèles de combustion non-prémélangée	29
2.2	État de l'art de la LES appliquée à la combustion Diesel	37
2.2.1	Études LES de l'aérodynamique moteur	38
2.2.2	LES de la combustion dans les moteurs Diesel	39
2.2.3	Calculs Diesel en bombe	42
2.2.4	Discussion de l'approche retenue.	42
3	Équations LES diphasiques et réactives	45
3.1	Modélisation de la phase porteuse	45
3.1.1	Équations de la phase porteuse	46
3.1.2	Modèle de sous-maille	47
3.1.3	Termes non fermés résultants du filtrage des équations de Navier-Stokes	48
3.2	Modélisation de la phase dispersée	50



3.2.1	Formalisme mésoscopique Eulérien	52
3.2.2	Modèles pour la fermeture du mouvement décorrélé	53
3.2.3	Modèles pour la fermeture du terme de sous-maille	54
3.2.4	Extension aux sprays denses : effets de collisions	54
3.2.5	Termes de couplages gaz - liquide	57
4	Modèles de flammelettes instationnaires	61
4.1	Flamme de diffusion laminaire à contre-courant	61
4.2	Flamme de diffusion approchée	64
4.2.1	Présentation du modèle	65
4.2.2	Temps de calcul	66
4.3	Validation des flammes de diffusion approchées	68
4.3.1	Prédiction des délais d'auto-inflammation	68
4.3.2	Structure de la flamme de diffusion en auto-inflammation	71
4.3.3	Diffusion des espèces	73
4.4	Conclusion	78
5	Simulation aux grandes échelles d'un spray Diesel en enceinte fermée	79
5.1	Assessing LES models based on tabulated chemistry for the simulation of Diesel spray combustion	79
5.1.1	Introduction	80
5.1.2	Basic equations	83
5.1.3	LES models for non-premixed combustion based on tabulated chemistry	87
5.1.4	LES of an auto-igniting liquid jet	95
5.1.5	Results and discussion	101
5.2	Résultats complémentaires	115
5.2.1	Influence du taux d'introduction	115
5.2.2	Dépendance au maillage	117

6	Simulation du spray H	121
6.1	Large-Eddy Simulation of Diesel Spray Combustion with Exhaust Gas Recirculation	122
6.1.1	Introduction	122
6.1.2	The ADF-PCM model	123
6.1.3	LES transport equations for the ADF-PCM approach	126
6.1.4	Numerical set-up	129
6.1.5	Results and discussion	132
6.1.6	Conclusion	136
6.2	Résultats complémentaires	138
6.2.1	Évolution de la hauteur d'accrochage	138
6.2.2	Influence du maillage	140
6.2.3	Influence du schéma cinétique	145
6.2.4	Comparaisons entre les modèles THR, THR-PDF et ADF-PCM	149
7	Conclusions et perspectives	155
7.1	Conclusions	155
7.2	Axes de recherche pour l'approche ADF-PCM	157
7.2.1	Prise en compte de l'étirement effectif	157
7.2.2	Description des phénomènes d'allumage et d'extinction en combustion non-prémélangée	158
7.3	Vers le calcul moteur	158
7.3.1	Problèmes de la taille des tables	158
7.3.2	Modélisation prédictive de l'injection liquide et de l'écoulement à proximité de l'injecteur.	159
7.3.3	Évolution de l'équilibre CO / CO_2 la détente	160
7.3.4	Prédiction de la formation de NO_x et de suies	160
	Bibliographie	176



A	Génération de la table ADF-PCM	177
A.1	Création des tables de réacteurs homogènes	177
A.2	Résolution des flammelettes	178
A.3	Génération de la table finale	179

Chapitre 1

Introduction

Les combustibles fossiles représentaient en 2009 plus de 80% de l'énergie consommée au niveau mondial [ADEME \(2012\)](#). L'utilisation à grande échelle de cette ressource bon marché et fiable a permis de soutenir un développement sans précédent durant les dernières décennies. Le domaine des transports en a fortement profité, avec un parc automobile passant d'environ cent millions de véhicules en 1950 à plus d'un milliard en 2007. Poussé par les pays émergents, le parc automobile mondial devrait continuer à croître, atteignant 1,4 milliard de véhicules en 2030 ([Syrota, 2008](#)).

L'importance du parc automobile n'est pas sans effet sur l'environnement. Les polluants émis lors de la combustion (CO , NO , NO_2 , suies...) posent de sérieux problèmes de santé publique tandis que le CO_2 est en partie responsable de l'effet de serre. Afin de protéger l'homme et son environnement, les législateurs ont mis en place différentes réglementations visant à réduire à la fois les émissions polluantes et de CO_2 . Depuis 1993, les normes Euro limitent les émissions polluantes maximales autorisées pour les véhicules roulants vendus en Europe. La figure 1.1 montre l'évolution de ces normes depuis leur introduction pour les véhicules Diesel.

Comme nous pouvons le voir, les émissions autorisées ont été drastiquement réduites durant les vingt dernières années. De plus de nouveaux polluants sont pris en compte dans la législation, comme par exemple les oxydes d'azote (NO_x) depuis 2001. Les constructeurs ont massivement investi pour faire face à ces réglementations tout en tentant de limiter au maximum les surcoûts de fabrication des véhicules. On a ainsi vu apparaître en l'espace de quelques années de nombreuses technologies visant, soit à améliorer le rendement et à réduire les émissions à la source, soit à développer des systèmes de post-traitement des polluants. Utilisée de façon complémentaire aux études expérimentales, la simulation prend une part croissante dans les phases de développement de ces technologies.



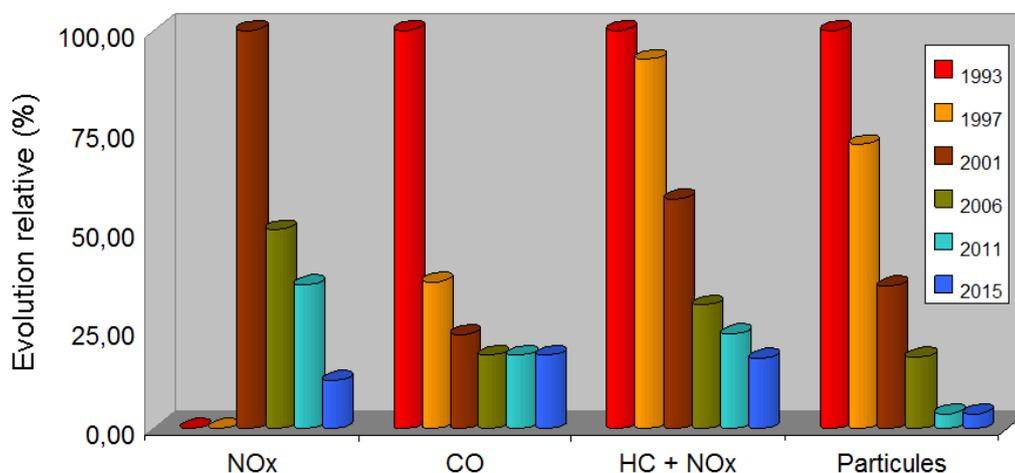


FIGURE 1.1 – Évolution relative (référence 1993) des émissions réglementaires pour les véhicules Diesel en Europe de 1993 à 2015 pour 4 polluants : les oxydes d’azotes NO_x , le monoxyde de carbone CO , la somme des oxydes d’azotes NO_x et des hydrocarbures imbrûlés HC et enfin les particules.

1.1 Rôle de la simulation dans les moteurs

La simulation numérique des moteurs à combustion interne peut se diviser en deux catégories ayant chacune des objectifs différents. La simulation système, basée sur des modèles zéro ou unidimensionnels, vise à simuler l’intégralité du système moteur, du groupe moto-propulseur (GMP) ou du véhicule. La description du fonctionnement de chacun des composants de ce système est simplifiée, l’accent étant mis sur les interactions entre les composants et le fonctionnement global. Puisque la géométrie est réduite à un cas zéro ou unidimensionnel, il est difficile de prendre en compte son effet sur les phénomènes physiques. Compte tenu des simplifications opérées par ces approches, celles-ci sont généralement caractérisées par des capacités prédictives *a priori* limitées et nécessitent au préalable la calibration des paramètres du modèle sur des résultats expérimentaux. Leurs temps de calcul sont faibles et peuvent atteindre, voir être inférieurs, au temps réel. Ces simulations sont particulièrement utilisées dans l’industrie où elles permettent par exemple de définir les stratégies de contrôle ou encore de réduire les matrices d’essais expérimentaux.

La simulation tridimensionnelle s’attache quant à elle à décrire les écoulements et leurs interactions avec les différents processus physiques (combustion, transferts de chaleur et de masse...) pour un élément du moteur. Les temps de calculs liés à ces simulations sont extrêmement importants comparés aux approches systèmes. Néanmoins, en représentant l’évolution des processus physiques dans l’espace et le temps, les informations fournies sont beaucoup plus riches et permettent *a priori* de prédire les caractéristiques du composant ou du sous-système étudié. Ce type de simulation est donc principalement utilisé pour la compréhension des phénomènes physiques présents et de leurs interactions complexes ou l’investigation de nouvelles approches. De plus,

les développements réalisés pour les modèles tridimensionnels peuvent être réduits pour formuler des modèles pour la simulation système (Richard, 2005; Bougrine et al., 2012).

Avec l'augmentation massive des puissances de calcul disponibles, la simulation tridimensionnelle de la mécanique des fluides (CFD pour Computational Fluid Dynamics) s'est fortement développée en quelques années. Celle-ci permet maintenant d'assister de façon efficace le développement de nouvelles technologies. Elle est utilisée de façon à enrichir la compréhension des phénomènes physiques et à capitaliser les avancées sous une forme réutilisable. Les modèles numériques et les choix retenus sont validés à partir de résultats expérimentaux. Drake and Haworth (2007) ont par exemple présenté les optimisations et les améliorations réalisées sur 5 moteurs à allumage commandé grâce à l'utilisation conjointe de l'expérience et de la simulation. La CFD tridimensionnelle opère à tous les niveaux du cycle moteur, de la prédiction du spray et de l'écoulement jusqu'aux polluants émis (Reitz and Rutland, 1995). La figure 1.2 présente les trois approches permettant de décrire l'écoulement selon les échelles de la turbulence qu'elles résolvent.

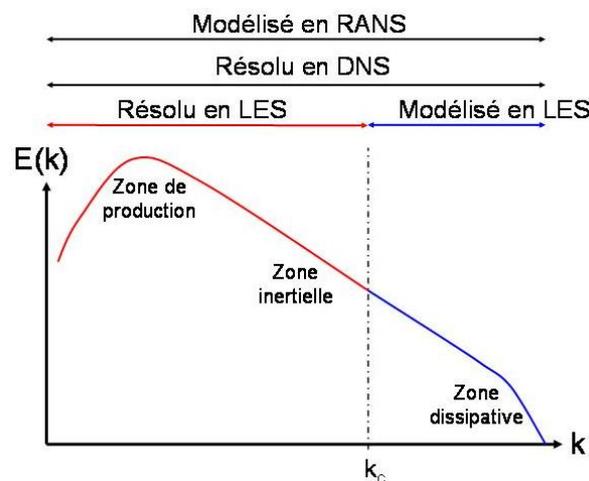


FIGURE 1.2 – Spectre de l'énergie cinétique turbulente E en fonction du nombre d'ondes k .

La simulation numérique directe (DNS pour Direct Numerical Simulation) résout toutes les échelles de la turbulence (Fig. 1.2). Peu d'hypothèses sont introduites, au prix d'un coût en temps de calcul extrêmement important. Pour réaliser ce type de calculs, il faut en effet un maillage capable de résoudre non seulement toute la gamme de structures turbulentes mais aussi celles de la chimie et de la phase liquide. Une connaissance très fine des conditions aux limites et un schéma numérique d'ordre élevé introduisant très peu de dissipation et de dispersion numérique sont aussi requis. Pour ces raisons, la simulation de moteurs Diesel avec cette approche n'est pas envisageable. La DNS est généralement utilisée comme *expérience numérique* sur de très petits volumes. Elle permet d'analyser les phénomènes liés aux petites échelles ou encore de valider certains modèles comme les modèles de sous-maille (Pera et al., 2006; Chen, 2011).

La simulation moyennée (RANS pour Reynolds Averaged Navier-Stokes) résout uniquement l'écoulement moyen et donc, dans le cas de configurations moteurs, le cycle moyen. L'ensemble des



échelles de la turbulence est modélisé (Fig. 1.2), basé sur une moyenne statistique des équations de Navier Stokes. Les maillages requis pour ce type de calcul sont beaucoup plus grossiers. De plus, cette méthode possède l'avantage d'être numériquement très robuste. Ces avantages expliquent que l'approche RANS soit la plus utilisée, particulièrement pour les configurations industrielles. De nombreux calculs de moteurs Diesel ont été réalisés à partir de cette approche (Lehtiniemi et al., 2006; De Paola et al., 2008; Jay and Colin, 2011).

La simulation aux grandes échelles (LES pour Large-Eddy Simulation) est un compromis entre la DNS et le RANS. Comme le montre la figure 1.2, cette approche résout les plus grandes échelles de la turbulence et modélise les plus petites. Elle est basée sur le filtrage spatial des équations de Navier-Stokes permettant de séparer les échelles de la turbulence. La résolution des grandes structures de l'écoulement permet de prendre en compte leur dépendance à la géométrie et leur caractère instationnaire. De plus, elles contiennent la majorité de l'énergie cinétique de l'écoulement. La modélisation est réservée aux plus petites échelles de la turbulence, dont les caractéristiques sont supposées plus génériques. Avec les moyens de calcul récents, cette approche connaît un fort essor et commence à être appliquée à des configurations industrielles (Richard et al., 2007; Vermorel et al., 2009; Staffelbach et al., 2009).

Avec l'augmentation des puissances de calculs, des simulations toujours plus ambitieuses peuvent être réalisées. Néanmoins, l'amélioration de la prédictivité de la CFD n'est pas seulement liée à l'augmentation des puissances de calcul. La formulation de méthodes numériques plus précises et le développement de modèles permettant la description fine des phénomènes physiques a permis d'améliorer de façon significative les capacités de prédiction de la simulation. De nombreux développements restent nécessaires dans ce domaine pour exprimer le plein potentiel de la CFD.

1.2 Caractéristiques de la motorisation Diesel

De façon à mieux comprendre les enjeux et les difficultés de la simulation d'un moteur Diesel, il est nécessaire de bien comprendre son fonctionnement et surtout les conditions dans lequel il opère.

Le fonctionnement d'un moteur Diesel se divise en 4 temps résumés par la figure 1.3 : l'admission de l'air dans la chambre de combustion, la compression des gaz, la combustion dont le travail est récupéré par détente des gaz brûlés et leur échappement.

Phase d'admission. Lors de la phase d'admission, les soupapes d'admission s'ouvrent. Dans un même temps, le piston descend dans la chambre de combustion, permettant ainsi son remplissage. Sur tous les moteurs Diesel récents, un turbocompresseur permet d'augmenter la densité des gaz de façon à augmenter la masse admise dans la chambre de combustion. L'air peut être associé à des gaz brûlés provenant de l'échappement (EGR pour Exhaust Gas Recirculation).

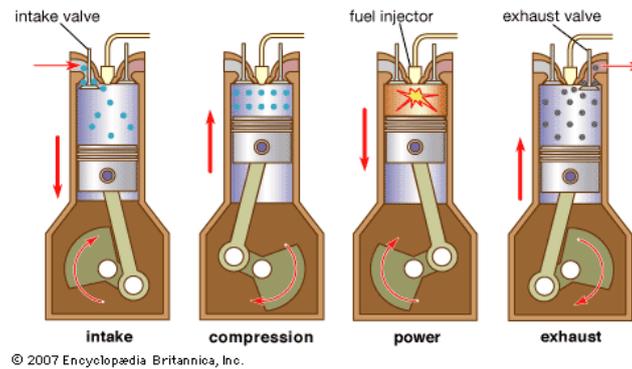


FIGURE 1.3 – Schéma des 4 temps du cycle d'un moteur Diesel.

Phase de compression. Une fois le PMB (Point Mort Bas) atteint, le piston commence à remonter et les soupapes se referment empêchant les gaz de ressortir. La pression et la température augmentent de façon importante. L'ordre de grandeur des conditions thermodynamiques peut ainsi atteindre 80 bars et 950 K avant l'injection. Le carburant est injecté plus ou moins tard dans la phase de compression suivant les technologies utilisées et le point de fonctionnement. Les fortes pressions d'injection (de l'ordre de 2000 bar) vont, d'une part, permettre une atomisation très fine du liquide assurant une évaporation rapide et d'autre part favoriser le mélange, le jet étant fortement turbulent. L'évaporation fait diminuer la température dans le spray, particulièrement en son centre, là où la plus grande quantité de carburant s'est évaporée. La combustion s'initie dans les zones où le mélange est le plus favorable, puis se propage à l'ensemble du jet. Une visualisation directe de la combustion dans un cylindre de moteur Diesel à trois instants est présentée par la figure 1.4.

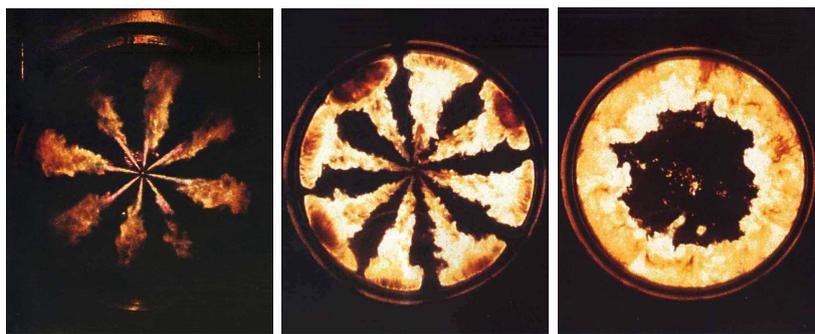
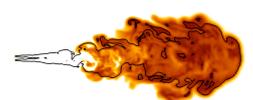


FIGURE 1.4 – Visualisation directe de l'évolution de la combustion à l'intérieur d'un cylindre de moteur Diesel lors de l'injection du carburant (Auto Innovation, 2012).

Phase de détente. Dans cette phase, le piston redescend vers le PMB, faisant baisser la température et la pression dans la chambre tout en récupérant le travail fourni par la combustion. Lors de la détente, la pression et la température baissent de façon suffisante pour provoquer localement un figeage des réactions et notamment de l'équilibre CO / CO_2 .



Phase d'échappement. Les soupapes d'échappement s'ouvrent avant l'arrivée au PMB et permettent l'évacuation des gaz. Le piston remonte ensuite jusqu'au PMH, chassant les gaz brûlés de la chambre de combustion.

La figure 1.5 présente les zones de formation des oxydes d'azotes (NO_x) et des suies en fonction de la température et de l'inverse de la richesse. Nous pouvons voir que ces polluants se forment dans deux zones bien distinctes en termes de température et de richesse. Le mélange globalement pauvre, associé aux températures élevées présentes dans la chambre de combustion engendrent des NO_x . Il est à noter que la quantité de NO_x produite augmente de façon exponentielle avec la température. L'évaporation du carburant lors de la phase de compression génère des zones localement très riches et relativement froides, zones pour lesquelles la formation de suies est importante.

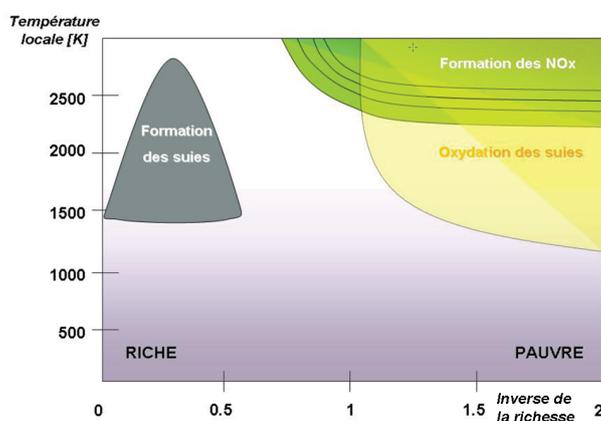


FIGURE 1.5 – Diagramme de Pischinger et al. (1988) indiquant les zones de formation des suies et des NO_x en fonction de la température et de l'inverse de la richesse.

Afin de satisfaire à la norme Euro 6 (Fig. 1.1), de coûteux systèmes de post-traitement doivent être intégrés dans la ligne d'échappement. Des systèmes spécifiques comme le catalyseur 2 voies (oxydation du CO en CO_2), le filtre à particules pour les suies ou le SCR (Selective Catalytic Reduction) pour les NO_x sont nécessaires. Ces systèmes de dépollution représentent une part de plus en plus importante des coûts de construction d'un véhicule et réduisent son rendement (augmentation de la masse du véhicule, pertes de charges dans l'échappement). Les marges de manœuvre pour l'amélioration des systèmes de post-traitement sont ainsi restreintes. Le respect des futures normes passe donc par l'augmentation du rendement et la limitation à la source de la formation des polluants, c'est à dire lors de la combustion, de l'évolution de la composition des gaz brûlés dans le cylindre, de la détente et de l'échappement. Cela a conduit à l'apparition de nouvelles technologies comme la combustion HCCI (Homogeneous Charge Compression Ignition) dont le but est, via l'injection précoce du carburant, l'obtention d'un mélange plus homogène produisant moins de particules. Nous pouvons aussi citer l'approche *Dual Fuel* qui propose quant à elle de combiner les avantages des moteurs Diesel et à allumage commandé via l'injection

indirecte de méthane (ou d'un autre gaz peu propice à l'auto-inflammation) ensuite allumé par un spray Diesel auto-inflammant.

1.3 Simulation tridimensionnelle de moteurs Diesel

Les caractéristiques de la motorisation Diesel rendent sa simulation difficile. En effet de nombreux phénomènes physiques interagissent au sein de la chambre de combustion et doivent être modélisés.

- La physique du spray est particulièrement complexe et fait intervenir de nombreux phénomènes. Selon la géométrie et les pressions d'injection, des phénomènes de cavitation peuvent apparaître dans l'injecteur. Ceux-ci influencent fortement la dynamique de l'écoulement dans l'injecteur, modifiant de façon significative les caractéristiques du spray et du mélange en résultant. Une fois hors de l'injecteur, le liquide se disloque en ligaments dont la taille caractéristique est proche de celle du spray. Ce phénomène d'atomisation primaire se produit près de l'injecteur. Il est suivi par l'atomisation secondaire, phase pendant laquelle les ligaments liquides se séparent pour former des gouttes de différentes tailles. Enfin, le processus d'évaporation est présent tout au long de ces phases d'atomisation. Le faible diamètre des gouttes résultantes de l'atomisation secondaire et les fortes températures présentes dans la chambre de combustion conduisent à une évaporation très rapide du liquide.
- La prédiction de l'aérodynamique interne de l'écoulement est, elle aussi, délicate. Celle-ci est dépendante de la géométrie (en mouvement) de la chambre de combustion mais aussi d'éléments extérieurs comme les tubulures d'admission. L'injection du liquide à de fortes vitesses va générer des zones de turbulences en périphérie du spray, impactant sur le mélange air-carburant et pilotant la dynamique globale de l'écoulement.
- Enfin, la combustion dans les moteurs Diesel est extrêmement difficile à prédire. Elle dépend à la fois des caractéristiques de l'injection liquide et du mélange. Elle s'initie par l'auto-inflammation du carburant évaporé puis se développe sous forme majoritairement non-prémélangée. Le délai d'auto-inflammation et sa localisation dépendent des conditions locales de la température, de la pression ou encore de la richesse du mélange. De plus, ils sont fortement liés aux phénomènes turbulents locaux pilotant ce dernier. Les carburants lourds utilisés dans les moteurs Diesel sont une source de difficulté supplémentaire en termes de modélisation. Leur oxydation fait intervenir plusieurs centaines d'espèces au travers de plusieurs milliers de réactions. De plus, ces carburants possèdent une zone de NTC (Negative Temperature Coefficient), typiquement située entre 800 et 1000 K et variant en fonction des conditions locales de l'écoulement (pression, richesse, taux de gaz recirculants). Dans ces zones, le délai d'auto-inflammation augmente (ou reste quasi constant) avec la température alors que le comportement inverse est observé pour les zones à plus faible ou plus forte température.



De par la variété des phénomènes physiques présents dans les moteurs Diesel ainsi que de leur complexité, la réalisation de simulations prédictives reste encore un défi pour la communauté scientifique.

1.4 Objectifs du présent travail

De façon à permettre le développement de nouvelles technologies, une compréhension fine des phénomènes physiques présents dans la chambre de combustion est nécessaire. Pour cela, nous proposons ici la mise en place d'une approche permettant la réalisation de simulations aux grandes échelles (LES) pour les moteurs Diesel. Notre travail portera plus spécifiquement sur le développement et la validation d'un modèle de combustion adapté aux caractéristiques de ces moteurs. Il ne traitera pas de la simulation complète de ce moteur mais se limitera à l'étude de cas de sprays auto-inflammants en conditions Diesel dans une enceinte fermée. Ces expériences possèdent l'avantage d'opérer dans des conditions bien définies et proposent une grande variété de mesures permettant de valider finement l'approche choisie. Nous les utiliserons de façon à vérifier les capacités prédictives du modèle d'injection utilisé dans cette étude, celui-ci n'ayant encore jamais été appliqué à des cas Diesel. Ils permettront ensuite de valider le mélange air carburant et finalement le modèle de combustion en termes de délai d'auto-inflammation, de dégagement de chaleur et de hauteur d'accrochage de la flamme. Ce travail constitue donc une première étape vers la LES de moteurs Diesel et permet de poser et valider les bases nécessaires à ces simulations.

Bien que coûteux en temps de calcul et nécessitant des schémas numériques et des maillages adaptés, un formalisme LES a été choisi pour cette étude. Cette approche ne modélise que les plus petites structures de la turbulence. L'influence du modèle de turbulence est donc plus faible que pour un formalisme RANS, permettant *a priori* une meilleure prédictivité du mélange. De plus, la description locale de l'écoulement permet une prise en compte accrue des effets de stratification du carburant sur la combustion. Cette description locale de l'écoulement alliée à la capacité de la LES à prédire les phénomènes acycliques pourrait permettre l'étude de variabilités cycliques des émissions polluantes. Enfin, la LES est adaptée à la prédiction de phases présentant un caractère fortement instationnaire. Elle ouvre des perspectives futures pour la prédiction des phases transitoires rapides (démarrage à froid, modification de la charge) ou des changements de mode de combustion (Diesel classique vers HCCI, HCCI vers *Dual Fuel*...).

Comme nous l'avons vu, le moteur Diesel opère dans des conditions spécifiques. Les conditions de fonctionnement varient de façon importante au sein de la chambre de combustion, que ce soit en termes de pression, de température, de richesse et même de taux de gaz recirculants. Les carburants lourds utilisés dans ces conditions peuvent présenter des phénomènes de NTC. Les capacités de prédiction, sur ces gammes de fonctionnement, de schémas cinétiques réduits ne sont *a priori* pas suffisantes. Ainsi, le modèle de combustion devra pouvoir prendre en compte des schémas

cinétiques détaillés. De façon à limiter les temps de calcul liés à l'utilisation de ces schémas, une approche utilisant la tabulation de la chimie sera nécessaire. Elle devra modéliser avec précision les phénomènes physiques présents lors de la combustion Diesel, c'est-à-dire l'auto-inflammation ainsi que la combustion dans des milieux fortement stratifiés. Enfin, les compositions chimiques devront pouvoir être prédites dans toutes les conditions thermodynamiques rencontrées.

L'approche ADF-PCM (Michel, 2008) initialement développée en RANS et répondant aux critères précédemment définis, sera utilisée. Elle est basée sur l'hypothèse de flammelette (Peters, 1984) selon laquelle une flamme turbulente peut être décrite comme un ensemble de flammes laminaires étirées par l'écoulement. Elle consiste à tabuler des flammes de diffusion approchées en auto-inflammation. Celles-ci présentent l'avantage, moyennant certaines hypothèses, d'être beaucoup plus rapides à calculer que des flammes de diffusion. Cette approche sera implantée dans le solveur LES compressible AVBP (Moureau et al., 2005), permettant le calcul de configurations industrielles sur un nombre important de processeurs grâce à un excellent parallélisme numérique (Staffelbach et al., 2005; Staffelbach and Poinso, 2006).

Ce travail s'inscrit dans le projet global d'IFP Energies Nouvelles (IFPEN) consistant à développer des approches prédictives de la combustion dans les moteurs à combustion interne. Nous nous appuyerons sur certains travaux précédemment réalisés en ce sens au sein d'IFPEN. Ainsi les développements réalisés par Martinez (2009) seront utilisés de façon à simuler l'injection liquide avec un formalisme mésoscopique eulérien. Nous nous baserons aussi sur les travaux de Galpin (2007) traitant des modèles de tabulation de la chimie, ainsi que ceux de Michel (2008) pour l'utilisation du modèle ADF-PCM.

1.5 Organisation du manuscrit

Ce manuscrit s'articule autour des chapitres suivants :

- Une revue bibliographique des approches publiées est présentée dans le chapitre 2. Elle s'intéresse dans un premier temps aux modèles permettant de décrire la combustion non-prémélangée caractéristique des moteurs Diesel. Les travaux existants traitant de la LES Diesel sont ensuite discutés, ce qui permet à la fois de situer ce travail dans le contexte et de souligner ses originalités.
- La simulation de configurations Diesel requiert la description de l'écoulement gazeux mais aussi de l'injection liquide du carburant et de l'interaction entre ces deux phases. Le chapitre 3 présente les équations modélisant ces phénomènes. Les équations de Navier-Stokes modélisant la phase gazeuse ainsi que les fermetures nécessaires aux termes résultant du filtrage LES sont présentées. La phase liquide, décrite par un formalisme mésoscopique Eulérien, ainsi que les termes de couplage entre les deux phases sont ensuite introduits.
- Le chapitre 4 analyse la structure de l'auto-inflammation et de la combustion de flammes



de diffusion laminaire à contre-courant. Les résultats obtenus sont comparés avec ceux de flammes de diffusion approchées, utilisées à la base du modèle ADF-PCM. L'objectif est ici de valider les hypothèses de ces flammes approchées.

- Le chapitre 5 présente l'application du modèle ADF-PCM ainsi que de trois autres modèles de combustion tabulée à l'expérience d'un spray liquide auto-inflammant dans une enceinte close pour des conditions thermodynamiques proches de celles observées dans un moteur Diesel. Le but est ici de valider le modèle ADF-PCM et de comparer ses résultats aux autres approches. Celles-ci diffèrent par les hypothèses réalisées sur les interactions entre la turbulence et la chimie.
- Le chapitre 6 applique le modèle ADF-PCM à l'expérience du Spray H réalisée dans le cadre de l'ECN (Engine Combustion Network). Les prédictions du modèle ADF-PCM sont comparées avec les données expérimentales pour différents taux d'EGR. Des comparaisons quant à l'influence du schéma cinétique ainsi que du maillage sont aussi présentées.
- Le chapitre 7 conclut ce rapport et donne les perspectives pour une application à la simulation de moteurs Diesel. Il est suivi de l'annexe A qui présente les détails de la génération d'une table ADF-PCM.

Chapitre 2

Étude bibliographique de la simulation aux grandes échelles de moteurs Diesel

Le but de ce chapitre est de situer l'approche que nous utiliserons pour la simulation aux grandes échelles (LES) de moteurs Diesel. Pour cela, nous présentons tout d'abord les différentes approches permettant de décrire la combustion (Sect. 2.1) pour des configurations non-prémélangées typiques du moteur Diesel, que ce soit pour un formalisme RANS ou LES. La section 2.2 traite de l'intérêt et des attentes de l'utilisation de la LES pour simuler l'écoulement dans la chambre de combustion puis des travaux de LES de moteurs Diesel ou de sprays Diesel en enceinte fermée. Elle permet de détailler les approches utilisées pour la LES Diesel et met en lumière le caractère original de ce travail.

2.1 Principaux modèles de combustion non-prémélangée

L'objectif des modèles de combustion est de déterminer le taux de réaction des espèces et le dégagement de chaleur. Nous ne décrivons dans cette section que ceux traitant de la combustion non-prémélangée basés sur une chimie complexe, semi-détaillée ou réduite. Les approches supposant une chimie simplifiée ou infiniment rapide ne sont donc pas rappelées car leurs capacités de prédiction ne sont *a priori* pas suffisantes pour décrire l'oxydation d'un carburant lourd sur de larges plages de fonctionnement. Les modèles présentés peuvent être classés selon deux critères : la méthode employée pour calculer les réactions chimiques ainsi que celle utilisée pour décrire les effets de la turbulence sur la combustion. De façon à donner au lecteur une vue globale de ces modèles, la figure 2.2 référence les différentes approches de combustion dont nous allons discuter dans cette section. Il est à noter que ce choix de classification n'est pas le seul possible.

Pour les modèles que nous allons décrire, la chimie peut être représentée de deux façons différentes : elle peut être calculée en ligne ou tabulée. L'utilisation directe de schémas cinétiques



dans le code de CFD requiert des capacités de calcul importantes. Le code CFD doit en effet transporter toutes les espèces du schéma. De plus, les temps caractéristiques très courts de la combustion nécessitent l'utilisation d'un solveur cinétique de façon à ne pas pénaliser le pas de temps du code de CFD. Pour ces raisons, cette approche se limite à l'utilisation de schémas cinétiques réduits. Pour les approches de tabulation, la résolution de la chimie est réalisée avant le calcul CFD. Elle est obtenue à partir de cas simples (réacteurs homogènes (RH), flammes de diffusion ou de prémélange laminaires...) calculés pour différentes conditions initiales (pression, température, composition des gaz...). Les résultats obtenus sont stockés dans une base de données en fonction d'un nombre de paramètres réduits permettant de caractériser la combustion. Lors du calcul CFD, les taux de réaction des espèces (ou leurs fractions massiques) sont extraits de la table par interpolation entre les différentes valeurs tabulées. Il n'est plus nécessaire de transporter toutes les espèces mais seulement les paramètres d'entrée de la table, ce qui réduit grandement les temps de calcul, notamment pour les schémas cinétiques détaillés. L'utilisation d'approches tabulées dans des cas complexes pour lesquels de nombreux paramètres d'entrée sont nécessaires peut néanmoins devenir problématique. Les tailles mémoires des tables peuvent être importantes, tout comme leur temps de génération.

Ces mêmes modèles font différentes hypothèses concernant les effets de la turbulence sur la combustion. L'hypothèse la plus forte consiste à ne pas considérer le mouvement turbulent. La combustion est supposée homogène à l'échelle de la cellule (RANS) ou du filtre (LES). Les taux de réaction laminaire obtenus, soit directement par le schéma cinétique, soit par la tabulation, sont directement utilisés dans le code CFD. La seconde catégorie propose de décrire le mouvement turbulent via l'introduction d'une fonction densité de probabilité (PDF). Elle permet la description statistique des variables d'entrée du modèle de combustion, qu'il utilise directement un schéma cinétique (description statistique des espèces, de la température...) ou une approche tabulée (description statistiques des paramètres réduits). La dernière approche reprend l'utilisation de PDF pour décrire le mélange tout en supposant une structure de flamme à l'échelle de la cellule ou du filtre. Elle est basée sur l'approche de flammelettes (Peters, 1984) qui considère qu'une flamme turbulente peut être localement représentée par une flamme laminaire étirée par l'écoulement. Cette hypothèse n'est valable que pour des régimes de combustion où l'épaisseur de la flamme reste faible comparée aux échelles de la turbulence. Ces régimes sont généralement caractérisés par deux nombres adimensionnés : le nombre de Damköhler Da représentant le rapport entre les temps caractéristiques de l'écoulement et de la combustion ainsi que le nombre de Reynolds turbulent Re_T représentant le rapport entre les forces d'inertie et les forces visqueuses. La figure 2.1 présente schématiquement les différents régimes de combustion en fonction de ces deux nombres adimensionnés.

Ainsi, le régime de flammelette est caractérisé par un nombre de Damköhler élevé ce qui correspond à un temps caractéristique de la chimie inférieur à celui de la turbulence. Dans la suite de ces travaux, nous feront l'hypothèse que les fortes pressions et températures présentes dans la chambre de combustion Diesel, impliquant un temps caractéristique de la chimie très court,

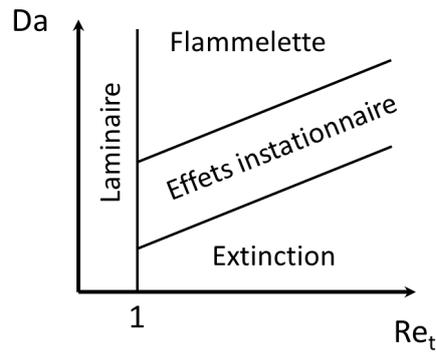


FIGURE 2.1 – Représentation schématique des différents régimes de combustion non-prémélangée en fonction du nombre de Damköhler Da et du nombre de Reynolds turbulent Re_t (Poinso and Veynante, 2011).

justifient de la validité de l’approche de flammelettes.

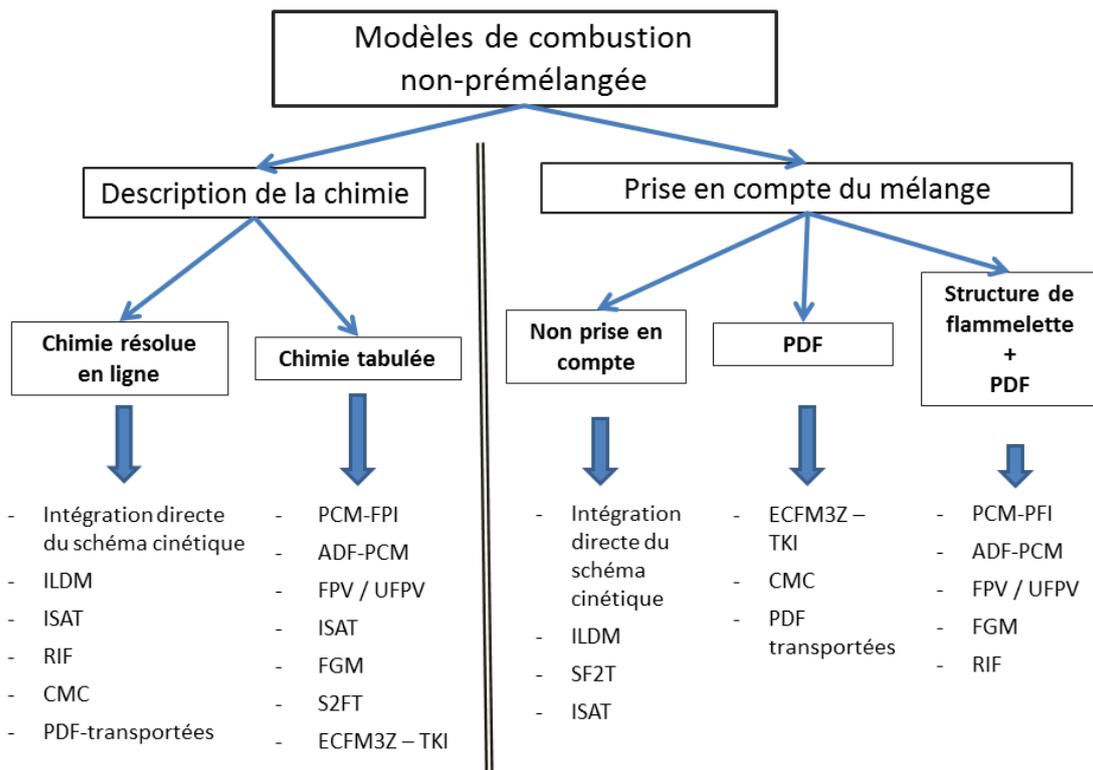


FIGURE 2.2 – Classification des modèles de combustion non-prémélangée en fonction de leur description de la chimie et de la structure de flamme.



2.1.0.1 Intégration directe de la chimie

L'approche la plus directe consiste à résoudre la chimie en parallèle du code CFD. Ainsi pendant le calcul, le code CFD fournit au solveur chimique les conditions thermodynamiques du point considéré ainsi que les fractions massiques des espèces. Celui-ci retourne les taux de réaction des espèces. Cette approche permet de résoudre le schéma cinétique sans introduire de biais mais impose que le code CFD transporte toutes les espèces du schéma cinétique. Pour cette raison, cette approche reste limitée à des schémas cinétiques réduits valables sur des plages plus limitées. Utilisée seule, cette approche a déjà été appliquée à des LES Diesel (Jhavar and Rutland, 2006). Elle considère dans ce cas la combustion comme homogène à l'échelle du filtre ou de la cellule.

2.1.0.2 Le transport de PDF

De façon à lever cette hypothèse d'homogénéité et à considérer l'impact de la turbulence, un modèle statistique peut être couplé au schéma cinétique. L'approche de transport de PDF (Pope, 1985; Vervisch et al., 1995) permet de résoudre le système suivant :

$$\tilde{f} = \int_{\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N} f(\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N) \tilde{P}(\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N) d\Psi_1 d\Psi_2, \dots, \Psi_N \quad (2.1)$$

avec f une variable quelconque et $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_N$ les variables thermodynamiques (pression, température) et les fractions massiques des espèces. La fonction f est directement déterminée par le schéma cinétique. La détermination de la PDF est obtenue via l'introduction d'équations de transport. Leur nombre est néanmoins particulièrement important et, dans la pratique, ces équations ne sont pas directement résolues. Des méthodes de Monte-Carlo sont utilisées et introduisent des particules stochastiques pour décrire la composition chimique (Haworth, 2010). Cette approche reste très coûteuse en temps de calcul. Elle a été utilisée pour des calculs Diesel en RANS (Zhang et al., 2005; Juddoo et al., 2011) mais pas en LES.

2.1.0.3 Le modèle CMC

Tout comme le modèle de transport de PDF, l'approche CMC (Conditionnal Moment Closure) développée par Klimenko (1990) et Bilger (1993) permet de lever l'hypothèse d'homogénéité et de considérer l'impact de la turbulence. Ce modèle introduit les moments conditionnés $(\overline{Y_k | Z^*})$ des espèces à la fraction de mélange Z . Ainsi, la valeur filtrée \tilde{Y}_k est obtenue en intégrant tous les moments conditionnés par une fonction densité de probabilité de la fraction de mélange $\tilde{P}(Z)$:

$$\tilde{Y}_k = \int (\overline{Y_k | Z^*}) \tilde{P}(Z^*) dZ^* \quad (2.2)$$

La fonction $\tilde{P}(Z)$ est présumée et les moments conditionnés $(Y_k | Z^*)$ sont obtenus par des équations de transport. Le nombre d'équations de transport nécessaire à ce modèle est donc

égal au nombre d'espèces multiplié par le nombre de sections de la fraction de mélange. Cette augmentation de la dimension du problème entraîne une augmentation importante du temps de calcul. Ce modèle a été appliqué pour des calculs Diesel RANS (De Paola et al., 2008; Lee and Huh, 2012). Un calcul Diesel en LES a aussi été réalisé (Seo et al., 2010).

2.1.0.4 Le modèle RIF

Le modèle RIF (Representative Interactive Flamelets) (Pitsch et al., 1995, 1996) a été développé à partir des travaux de Peters (1984) et décrit, contrairement aux modèles précédents, la structure locale de la flamme via une approche de flammelette (Peters, 1984). Pour cela, un code 1D résolvant l'équation des flammelettes est directement couplé au code CFD. Ainsi, tout au long du calcul, le code CFD fournit les grandeurs physiques (pression, température, étirement, fractions massiques des espèces...) au code de flammelettes qui calcule les taux de réaction des espèces. Une fonction densité de probabilité est ensuite appliquée de façon à tenir compte du mouvement turbulent. Cette approche possède l'avantage de rendre compte de l'historique de l'étirement. Néanmoins il n'utilise qu'une flammelette. Ainsi il ne peut considérer qu'une seule dissipation scalaire moyenne dans tout le volume de calcul. Le modèle EPFM (Eulerian Particule Flamelet Model) (Barths et al., 1998, 1999) a été dérivé du modèle RIF en intégrant des particules transportées par l'écoulement représentant chacune une flammelette. Ainsi, chaque particule considère une zone de calcul avec un étirement qui lui est propre ce qui permet de mieux prendre en compte l'hétérogénéité de la dissipation scalaire dans l'écoulement. Néanmoins, les temps CPU liés à la résolution des équations de flammelettes restent importants, même si dans les faits seul un faible nombre de flammelettes est utilisé. Une part importante des calculs Diesel RANS a utilisé cette approche (Barths et al., 2000; Mittal et al., 2012) mais aucune LES Diesel n'a été réalisée à ce jour.

2.1.0.5 L'approche ILDM

Les approches précédemment présentées nécessitent toutes le transport des espèces du schéma cinétique dans le code CFD. L'utilisation de modèles de chimie tabulée permet de remédier à ce problème. Ainsi, l'approche ILDM (Intrinsic Low Dimension Manifold) (Maas and Pope, 1992) est une méthode mathématique basée sur une analyse des temps caractéristiques d'un système réactif. Les espèces y sont tabulées en fonction d'un nombre réduit d'espèces à évolution lente. Cela permet de créer un sous espace appelé *Manifold* contenant le nombre d'espèces minimum requis pour représenter la chimie. Cette méthode présente de bons résultats même pour des substituts du carburant Diesel comme le n-heptane (Nafe and Maas, 2003). Néanmoins, elle n'est pas adaptée aux régimes basses températures car la chimie y est très lente. De façon à remédier à ce problème, Bykov and Pope (2007) ont développé la méthode REDIM (Reaction-Diffusion Manifold) permettant de prendre en compte des configurations pour lesquelles le couplage combustion-



diffusion joue un rôle important. Ce modèle présente de meilleurs résultats dans les zones de faibles températures. L'approche ILDM peut être couplée à une approche statistique comme le transport de PDF (Lipp and Maas, 2008) pour prendre en compte le mouvement turbulent.

2.1.0.6 L'approche PCM-FPI

L'un des inconvénients de l'approche ILDM est son manque de précision dans les régimes de basses températures. De façon à résoudre cette limitation l'approche FPI (Flame Prolongation of ILDM) (Gicquel et al., 2000) a été introduite. A l'origine, elle était basée sur la tabulation de flammes de prémélange. Elle désigne à l'heure actuelle une méthode de tabulation pouvant être appliquée aussi bien à des flammelettes (flammes de prémélange et de diffusion) que des RH. Elle est utilisée dans de nombreux modèles comme ADF-PCM (Michel et al., 2009b), PCM-CFM (Lecocq et al., 2011) ou encore F-TACLES (Auzillon et al., 2012). Elle repose sur la caractérisation de la base de données à partir de la fraction de mélange Z représentant la quantité de carburant et la variable d'avancement normalisée c permettant de décrire l'évolution de la combustion. Ainsi le calcul réactif multidimensionnel ne nécessite que l'ajout d'équations de transport pour les paramètres d'entrée de la base de données. L'enthalpie peut être ajoutée comme paramètre d'entrée de la table (Fiorina et al., 2003) pour permettre la prise en compte des pertes enthalpiques. De façon à prendre en compte la turbulence, l'approche FPI peut être couplée à l'approche PCM permettant de décrire la distribution statistique de Z et c en sous-maille. A la différence du modèle CMC où les moments conditionnés sont transportés, le modèle PCM (Vervisch et al., 2004) les présume, ce qui réduit considérablement les temps de calcul nécessaires. Tout comme FPI, ce modèle introduit l'hypothèse que les fractions massiques des espèces sont uniquement fonction de 2 paramètres pour un jeu de conditions thermodynamiques donné :

$$\tilde{\omega}_{Y_k} = \int_{Z^*} \int_{c^*} \dot{\omega}_{Y_k}(Z^*, c^*) \tilde{P}(Z^*, c^*) dc^* dZ^* \quad (2.3)$$

De façon à calculer les probabilités conjointes sur Z et c , cette approche fait une hypothèse d'indépendance entre ces deux variables (Vervisch et al., 2004). La probabilité conditionnée peut donc s'écrire :

$$\tilde{P}(Z^*, c^*) = \tilde{P}(Z^*) \bar{P}(c^* | Z^*) \quad (2.4)$$

où les fonctions P sont calculées par une β -PDF. Le modèle PCM présente l'avantage de pouvoir introduire de la chimie détaillée à faible coût. L'approche PCM-FPI a aussi bien été appliquée à des flammes turbulentes prémélangées (Galpin et al., 2008), partiellement prémélangées (Domingo et al., 2008) et non-prémélangées (Vervisch et al., 2004) mais aucune simulation de configurations moteurs n'a été publiée à ce jour.

2.1.0.7 L'approche FGM

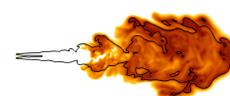
L'approche FGM (Oijen et al., 2001) est similaire à l'approche FPI présentée ci-dessus et a été développée simultanément. Son principe repose sur la tabulation de flammelettes laminaires monodimensionnelles qu'elles soient prémélangées ou non-prémélangées. L'approche FGM a été appliquée aux configurations réactives prémélangées (Van Oijen and De Goey, 2002), partiellement prémélangées (Van Oijen, 2004) et non-prémélangées (Vreman et al., 2008). Cette approche a récemment été appliquée au calcul LES d'un spray Diesel (Bekdemir et al., 2012).

2.1.0.8 Le modèle S2FT

L'utilisation de modèles de combustion tabulée pour des applications de plus en plus complexes (Jay and Colin, 2011) conduit à augmenter le nombre de paramètres d'entrée de la base de données. Les tailles des tables peuvent ainsi devenir problématiques. De façon à résoudre ce problème, le modèle S2FT (Self-Similar Flame Tabulation) (Ribert et al., 2006), reposant sur les mêmes fondements que FPI, permet une réduction très importante des tailles de tables en utilisant l'autosimilarité des taux de réaction ou des fractions massiques des espèces pour certaines chimies. L'utilisation de coordonnées réduites permet en effet de faire se superposer les taux de réaction de chaque espèce pour différentes conditions thermodynamiques. Des réductions de la taille de la table de plusieurs ordres de grandeurs ont été obtenues. Cette approche a été appliquée à la simulation RANS d'une flamme méthane - air turbulente (Fiorina et al., 2009) puis adaptée à des cas avec pertes enthalpiques et gaz recirculants (Wang et al., 2010). Cette méthode a récemment montré sa capacité à reproduire des phénomènes de flammes froides pour du n-heptane (Ribert et al., 2012).

2.1.0.9 Le modèle ISAT

Avec l'augmentation du nombre de paramètres d'entrée, le temps de génération d'une base de données ainsi que sa taille augmentent fortement. Le modèle ISAT (In Situ Adaptive Tabulation) proposé par Pope (1997) permet de réaliser la base de données lors du calcul CFD. Il résout dans un premier temps les taux de réaction des espèces via l'intégration d'un schéma cinétique. Les taux de réaction calculés sont stockés dans une base de données chimique qui se construit donc au fur et à mesure du calcul. Lorsque le code CFD a besoin d'un point proche des conditions d'un point obtenu précédemment, il obtient directement sa valeur par interpolation dans la table chimique. Le modèle ISAT peut donc être considéré soit comme un modèle de tabulation, soit comme un modèle intégrant le schéma cinétique. Il permet de limiter autant que possible le recours à la résolution directe de la chimie, en réutilisant des conditions déjà tabulées, ce qui permet de gagner jusqu'à trois ordres de grandeur en temps de calcul par rapport à l'utilisation directe d'un schéma cinétique. De plus, la taille occupée en mémoire par la base de données reste



faible puisque seul les points utilisés sont tabulés. Néanmoins, l'utilisation de schémas complexes n'est pas envisageable car l'espace des compositions serait beaucoup trop important pour être tabulé. Cette limitation a été levée par [Yang and Pope \(1998\)](#) avec le modèle ISATPD utilisant une décomposition de la tabulation à partir de ses directions principales. Seules celles-ci sont en fait tabulées. Le modèle ISAT a été couplé avec une approche statistique de transport de PDF de façon à prendre en compte l'hétérogénéité de la combustion à l'échelle de la cellule ([Gordona et al., 2007](#)). Il a été utilisé en LES ([James et al., 2007](#)) mais pas le modèle ISATPD.

2.1.0.10 Les modèles FPV et UFPV

Le modèle FPV (Flamelet Progress Variable) présenté [Pierce and Moin \(2004\)](#) repose sur l'hypothèse de flammelettes. Il tabule des flammes de diffusion 1D stationnaires via trois paramètres d'entrée : la fraction de mélange, la variable de progrès ainsi qu'un paramètre λ permettant d'identifier l'étirement de chaque flamme de manière univoque. Ce modèle prend en compte l'influence de la turbulence par l'utilisation de β -PDF représentant la distribution statistique de la fraction de mélange de sous-maille. De façon à améliorer les capacités de prédiction de l'auto-inflammation et de l'extinction, [Ihme et al. \(2005\)](#) ont utilisé une fonction de type β pour décrire la densité de probabilité du paramètre λ . Cela permet une nette amélioration des résultats. L'approche FPV basée sur des flammes stationnaires reste néanmoins inadéquate pour la prédiction de l'auto-inflammation. Une extension au modèle FPV appelée UFPV (Unsteady Flamelet Progress Variable) a ensuite été proposée ([Ihme and See, 2010](#)), utilisant directement des flammelettes instationnaires en auto-inflammation soumises à un étirement constant. Une approche similaire, pour laquelle la variable d'avancement est basée sur l'enthalpie ([Lehtiniemi et al., 2006](#)), a aussi été développée. Il est à noter que les temps de génération de ces bases de données peuvent être particulièrement importants pour des schémas cinétiques contenant plus d'une centaine d'espèces. C'est pourquoi ce modèle n'est généralement utilisé que pour des schémas cinétiques réduits.

2.1.0.11 Le modèle ADF-PCM

De façon à réduire les temps de génération des bases de données reposant sur la tabulation de flammelettes, particulièrement coûteuses en temps de calcul pour des schémas cinétiques détaillés, le modèle ADF-PCM (Approximated Diffusion Flame Presumed Conditional Moment) ([Michel et al., 2008](#)) a été introduit. Il permet la tabulation de flammes de diffusion approchées auto-inflammantes beaucoup plus rapide à calculer que des flammes de diffusion. La chimie est ici tabulée *a priori* à partir de RH à pression constante. L'équation des flammelettes ([Peters, 1984](#)) est ensuite résolue pour la variable de progrès Y_c uniquement, en utilisant la table de RH pour reconstruire le taux de réaction. Cela permet de réduire le temps de calcul lié à la réalisation de la table chimique de plusieurs ordres de grandeur. Une fois la bibliothèque de

flammelettes réalisée, elle est intégrée sur la fraction de mélange via une densité de probabilité de type β , en considérant que l'étirement est homogène à l'échelle du filtre. Une nouvelle version du modèle, appelée ADF-PCM $_{\chi}$ permet de lever cette hypothèse en représentant la distribution de l'étirement suivant une loi log-normale (Michel et al., 2009b). Enfin, ces deux modèles ont été comparés sur l'expérience d'une flamme liftée méthane air (Michel et al., 2009a).

2.1.0.12 Les modèles ECFM3Z et TKI

Le modèle ECFM (Colin et al., 2003) permet de simuler des flammes de prémélange. Il est basé sur la décomposition de la cellule de calcul en deux parties distinctes : une partie gaz frais et une partie gaz brûlés séparées par le front de flamme. Ce modèle a été étendu aux flammes de diffusion via l'intégration d'une décomposition en trois niveaux de mélange : une zone d'air pur, une zone de carburant pur et une zone de mélange (Fig. 2.3) décrite par un modèle de type EBU (Spalding, 1976). Cette décomposition peut être considérée comme une PDF constituée de trois fonctions de Dirac. Les échanges entre les zones non-prémélangées et de mélange sont modélisés via l'introduction d'un temps turbulent. La combustion du mélange et l'évolution des espèces est généralement prédite par un schéma cinétique simplifié. De façon à prendre en compte l'auto-inflammation, ce modèle est généralement couplé avec l'approche TKI (Tabulated Kinetics of Ignition) (da Cruz et al., 2004; Colin et al., 2005). Ce modèle utilise un précurseur de l'auto-inflammation transporté dans l'écoulement et quantifiant la progression du délai de flamme froide. Celui-ci atteint, le dégagement de chaleur lié à l'auto-inflammation est interpolé dans une table créée à partir de RH à pression constante. L'avantage de l'approche ECFM3Z-TKI est sa robustesse et sa capacité à traiter à la fois la flamme de prémélange et la flamme de diffusion. Néanmoins la représentation du mélange reste très simplifiée, tout comme la cinétique chimique.

2.2 État de l'art de la LES appliquée à la combustion Diesel

La simulation RANS de la combustion Diesel est un domaine pour lequel de nombreuses études ont été réalisées avec un grand nombre de modèles de combustion parmi lesquels nous pouvons citer des approches comme RIF (Barths et al., 2000), ECFM3Z (Jay et al., 2007a), le transport de PDF (Zhang et al., 2005), CMC (Wright et al., 2009), FPV (Lehtiniemi et al., 2006) ou encore VVTHC (Jay and Colin, 2011). L'utilisation de la LES dans le domaine de la combustion Diesel est une approche novatrice et peu de travaux traitent de ce sujet.



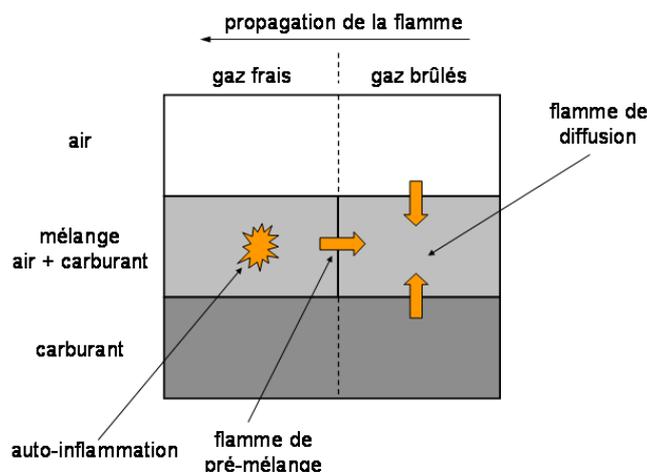


FIGURE 2.3 – Schéma de principe du modèle ECFM3Z.

2.2.1 Études LES de l'aérodynamique moteur

La simulation RANS a été utilisée dans de nombreuses études de façon à prédire l'aérodynamique interne de la chambre de combustion (Beard and Mokaddem, 1998; Caulfield et al., 1999). Les résultats expérimentaux sont correctement reproduits mais ces études soulignent la nécessité de calibrer les paramètres du modèle de turbulence.

La LES permet de prendre en compte les plus grandes structures de la turbulence et ne modélise que les plus petites. Ainsi, la description de la turbulence est moins dépendante du modèle de turbulence qu'en RANS, améliorant *a priori* les capacités de prédiction de l'écoulement et limitant l'utilisation de paramètres de calibrage. Les RMS (Root Mean Square) sont prédites directement à partir de l'écoulement résolu et ne nécessitent donc pas d'hypothèse d'isotropie comme en RANS.

Avec l'augmentation des puissances de calcul, les travaux utilisant la LES sont de plus en plus nombreux. Les capacités de prédiction accrues de la LES ont été mises en avant par différents travaux. Ainsi, Inagaki et al. (2010) ont comparé les approches RANS et LES sur une configuration de banc volute, constituée d'une soupape centrée ainsi que d'une conduite d'admission coudée. La comparaison des vitesses moyennes et des RMS avec l'expérience montre une meilleure prédiction de la LES comparée au RANS. De plus, seule la LES prédit correctement l'énergie turbulente totale dans le cylindre. Il est à noter que le maillage LES est tridimensionnel, avec une taille de cellule minimale de 0.1 mm alors que le maillage RANS est bidimensionnel et présente une taille de cellule minimale de 0.01 mm. Ces différences limitent la portée de cette étude. Liu and Haworth (2010) ont conduit sur une configuration piston-cylindre une comparaison entre les approches RANS et LES pour des cas avec et sans swirl. Une attention particulière a été portée

quant à l'utilisation de maillages suffisamment raffinés de manière à ce qu'au moins 80% de l'énergie cinétique totale soit résolue. Il est à noter que le respect de ce critère ne justifie pas à lui seul de la qualité de la LES. Le schéma numérique introduit de la viscosité dans le calcul CFD. L'utilisation d'un schéma numérique introduisant une trop forte viscosité numérique va diminuer l'énergie cinétique de sous-maille et ainsi artificiellement augmenter le pourcentage d'énergie cinétique résolue. Les approches RANS et LES ont été comparées en termes de vitesses moyennes et fluctuantes (RMS). Que ce soit pour les cas avec ou sans swirl, l'approche LES présente des résultats systématiquement plus proches de l'expérience que l'approche RANS. Cette étude a aussi montré que la résolution du maillage et le modèle de sous-maille étaient les éléments ayant la plus forte influence sur les résultats. Enfin il est à noter qu'aucune des constantes testées pour le modèle de sous-maille ne permet d'obtenir les meilleurs résultats pour tous les instants observés. Cela met en avant l'importance de la formulation dynamique pour le paramètre du modèle de sous-maille ou l'utilisation d'une équation de transport pour l'énergie cinétique de sous-maille.

2.2.2 LES de la combustion dans les moteurs Diesel

Les temps caractéristiques de la turbulence et de la chimie peuvent varier de façon importante dans un même cycle, ou selon le type d'injection choisi. A partir de ces observations, [Lee et al. \(2000\)](#) ont utilisé une combinaison de modèles décrivant chacun un type de combustion présent dans le moteur Diesel : le modèle Shell ([Halstead et al., 1977](#)) dédié à l'auto-inflammation, un modèle basé sur les temps caractéristiques pour la combustion prémélangée ([Kong et al., 1995](#)) ainsi qu'un modèle de tabulation de flammelettes stationnaires pour la combustion non-prémélangée. La transition entre les différents modèles est pilotée par le nombre de Damköhler représentant le rapport entre le temps turbulent et le temps chimique. Les prédictions du modèle sont validées sur les évolutions temporelles de la pression cylindre, du dégagement de chaleur ainsi que la quantité finale de NO_x émise. De la même façon [Lee et al. \(2002\)](#) ont utilisé ce modèle de combustion de façon à valider une nouvelle fermeture LES à une équation. Les approches RANS et LES prédisent toutes deux correctement les profils de pression moyenne. [Hu et al. \(2008\)](#) ont simulé des cas Diesel conventionnels et HCCI avec le modèle ETFS ([Rao and Rutland, 2003](#)) couplé à un schéma cinétique réduit décrivant la phase d'auto-inflammation. La transition entre les deux approches a été arbitrairement fixée à 1100 K. Les courbes de pression expérimentale ont été comparées avec l'expérience, montrant une bonne reproduction du délai d'auto-inflammation et une reproduction correcte de la phase de combustion principale. L'une des difficultés de telles approches consiste à définir un seuil pour la transition entre les différents types de combustion valable pour de larges gammes de fonctionnement ([da Cruz et al., 2001](#)).

De nombreux travaux résolvent directement le schéma cinétique au sein du code CFD. [Jhavar and Rutland \(2006\)](#) ont ainsi simulé deux cycles consécutifs d'un moteur Diesel dans des conditions HCCI à l'aide d'un schéma cinétique composé de 35 espèces. Les résultats montrent une bonne reproduction de la courbe de pression moyenne pour un cas Diesel que ce soit avec une approche



RANS ou LES. L'approche LES se distingue par une meilleure prédiction de la pression moyenne. L'observation des champs de fraction de mélange montre peu de différences entre les approches RANS et LES, probablement dues à de fortes viscosités numériques. [Li and Kong \(2008\)](#) ont réalisé des calculs LES pour un cas Diesel classique avec un schéma cinétique composé de 30 espèces et 65 réactions, couplé avec un modèle phénoménologique de suies. Cette approche a permis de prédire l'évolution qualitative des émissions de NO_x et de suies.

Les travaux précédents ne considèrent pas de fermeture décrivant l'interaction entre la chimie et la turbulence, faisant ainsi l'hypothèse d'une combustion homogène à l'échelle du filtre. Cette hypothèse paraît forte, surtout au regard des maillages particulièrement peu raffinés utilisés dans ces travaux. L'approche CMC ([Klimenko and Bilger, 1999](#)) présentée dans la section précédente peut être utilisée pour lever cette hypothèse. Ainsi [Seo et al. \(2010\)](#) ont réalisé la simulation d'un cas pHCCI (Partially Homogeneous Charge Compression Ignition) possédant une injection pilote puis une injection principale. Le modèle CMC est utilisé, couplé à un schéma cinétique composé de 44 espèces. Les prédictions en termes de pression moyenne et de dégagement de chaleur montrent une bonne reproduction des profils expérimentaux.

Tous les travaux présentés ici se basent sur le concept dit de "*engineering LES*". Celui-ci est basé sur les critères suivants :

- L'utilisation de maillages très peu raffinés. Les maillages ici utilisés présentent généralement des tailles de mailles de l'ordre du millimètre. Cette discrétisation est bien insuffisante pour la mise en place de LES. A titre d'exemple, le diamètre d'un injecteur Diesel est généralement compris entre 100 et 200 μm . La description de l'écoulement, même à quelques centimètres de l'injecteur, avec ce type de maillage ne permet de représenter ni les structures turbulentes, ni le mélange en résultant.
- L'utilisation de codes originellement développés pour la résolution d'approches RANS pour lesquels des fermetures LES ont été introduites. L'inconvénient de ces codes est qu'ils utilisent des schémas numériques fortement dissipatifs adaptés aux simulations RANS et non LES. La figure 2.4 présente une comparaison relative des ordres de grandeurs de la viscosité introduite par les modèles de turbulence RANS et LES ainsi que les schémas numériques nécessaires à leur mise en œuvre. La viscosité introduite par un schéma numérique doit toujours être inférieure d'environ un ordre de grandeur à la viscosité turbulente. Si ce critère n'est pas respecté, le résultat de la simulation sera fortement dépendant du schéma numérique. L'utilisation de schémas numériques destinés au RANS pour des simulations LES n'est donc pas appropriée.

Les champs bidimensionnels, lorsqu'ils sont présentés, montrent tous un écoulement peu turbulent similaire aux observations de calculs RANS. Cela est dû à l'utilisation de maillages grossiers couplés à des schémas numériques dissipatifs. De plus, les comparaisons sont très majoritairement basées sur les courbes des pressions moyennes, pour lesquelles les méthodes RANS obtiennent dans la plupart des cas des résultats satisfaisants. Le gain potentiel en termes de prédictivité

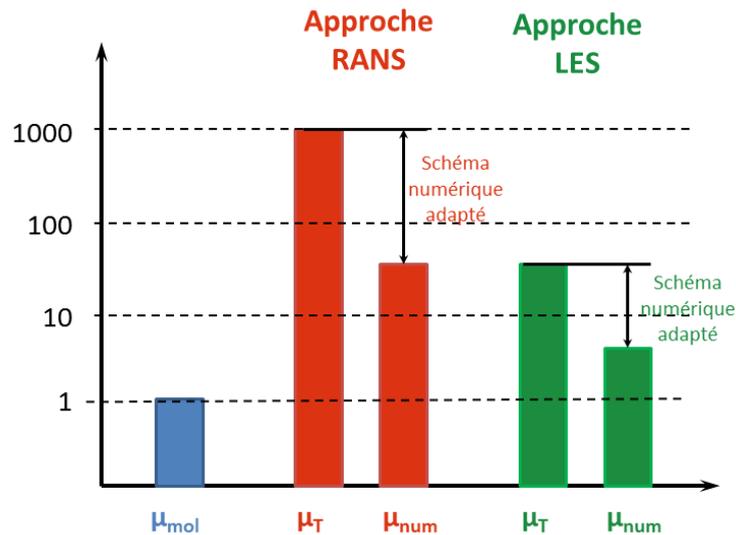
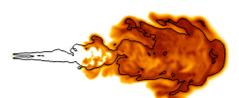


FIGURE 2.4 – Présentation de la viscosité turbulente μ_T pour les approches RANS et LES ainsi que de la viscosité numérique μ_{num} des schémas numériques requis pour leur mise en œuvre. La viscosité moléculaire μ_{mol} est ici utilisée comme unité de référence.

d'une approche LES est donc limité. Du fait de l'utilisation d'approches de type *engineering LES* le potentiel de la LES sur le RANS n'est ici pas mis en valeur. Enfin les schémas cinétiques utilisés contiennent tous un nombre réduit d'espèces (typiquement moins d'une centaine) ce qui paraît insuffisant pour représenter la cinétique chimique complexe des carburants lourds sur les plages de fonctionnement du moteur Diesel.

Néanmoins, tous les travaux en LES moteur ne reposent pas sur ces approches. Yu et al. (2006) ont réalisé des calculs HCCI LES utilisant un schéma centré à l'ordre 4 pour la diffusion et un schéma WENO (Yang and Peng, 2000) d'ordre 5 pour la convection. La combustion a été modélisée par une approche de tabulation d'un schéma cinétique composé de 233 espèces et 2019 réactions et couplé à une méthode de PDF présumées pour la fraction de mélange. L'étude a porté sur l'influence des hétérogénéités de température, montrant leur importance dans le processus d'auto-inflammation. Ce phénomène a ensuite été étudié par Joelsson et al. (2008) en réalisant la simulation de deux moteurs à bols carrés pour lesquels la seule différence provient de la méthode utilisée pour refroidir le piston. L'un est refroidi par un jet d'huile (considéré comme isotherme dans la simulation) tandis que l'autre est refroidi par air (considéré comme adiabatique dans la simulation). Ces deux méthodes vont induire des stratifications en température différentes, engendrant une modification de l'auto-inflammation, reproduite par la LES.



2.2.3 Calculs Diesel en bombe

La géométrie d'un moteur Diesel ainsi que les parties mobiles dont il est composé rendent l'obtention de mesures expérimentales très complexe et souvent entachée d'importantes incertitudes. Comme nous avons pu le voir (Sect. 2.2.2), les comparaisons entre simulation et expérience se limitent souvent aux courbes de pression et de dégagement de chaleur. L'utilisation d'enceintes à volume constant, pour lesquelles les stratégies d'injection et les conditions thermodynamiques sont proches de celles observées dans les moteurs Diesel permet de contourner ce problème. Ainsi l'ECN (Engine Combustion Network) (ECN, 2012) a mis en place l'expérience dite du Spray H dans le but de proposer une base de validation commune aux différents modèles utilisés pour la combustion Diesel. Les détails fournis concernant les conditions initiales ainsi que la richesse des résultats expérimentaux (Pickett et al., 2005; Idicheria and Pickett, 2007a) permettent une meilleure compréhension des phénomènes en jeu lors de la combustion Diesel.

De nombreux travaux basés sur une approche RANS ont utilisé le Spray H comme base de validation. A titre d'exemple, Gopalakrishnan and Abrahams (2002) ont utilisé le modèle de combustion RIF et comparé ses prédictions en termes de dégagement de chaleur et de hauteur d'accrochage. Tap and Veynante (2004) ont développé un modèle de surface de flamme de façon à prédire la distance d'accrochage de la flamme pour différentes densités et diamètres d'injecteurs. Plus récemment Azimov et al. (2010) ont appliqué le modèle ECFM3Z pour prédire la distance d'accrochage de la flamme ainsi que le dégagement de chaleur.

Seuls les travaux de Bekdemir et al. (2012) ont traité de la LES de calculs Diesel en bombe. Ils comparent les prédictions de l'approche de tabulation FGM (ici utilisée pour tabuler des flammes de diffusion laminaires), en termes de hauteur d'accrochage de la flamme et de délai d'auto-inflammation, avec les résultats expérimentaux pour différents taux d'EGR et températures. L'utilisation de cette approche sans fermeture de sous-maille fournit d'assez bons résultats. Néanmoins pour certains cas, cette approche se montre incapable de prédire la hauteur d'accrochage de la flamme, celle-ci se rapprochant de l'injecteur jusqu'à l'atteindre. L'introduction de différentes PDF a donc été testée. Celles-ci permettent de prendre en compte les fluctuations de sous-maille de la fraction de mélange, ce qui a pour résultat de réduire les taux de réaction maximaux généralement présents à la stœchiométrie. Les calculs de spray utilisant ces fermetures présentent un délai d'auto-inflammation plus long mais surtout permettent l'obtention de flammes stabilisées dans tous les cas étudiés.

2.2.4 Discussion de l'approche retenue.

Comme nous l'avons vu, les LES Diesel se limitent souvent à des approches de type *engineering LES*. Nous proposons ici la réalisation de simulations respectant les critères de la LES.

– Les schémas numériques dédiés à la simulation RANS sont généralement basés sur des ap-

proches *upwind* du premier ordre particulièrement dissipatives. Celles-ci présentent l'avantage d'être peu gourmandes en temps de calcul mais ne correspondent pas aux critères de la LES. Nous utiliserons dans ce travail un schéma numérique du second ordre centré de type Lax-Wendroff. Celui-ci est dédié à la LES et beaucoup moins dissipatif que les approches *upwind* du premier ordre.

- Les simulations seront réalisées sur des maillages raffinés. A titre d'exemple, les tailles caractéristiques des cellules présentes en zone de proche injecteur seront comprises entre 60 et 80 μm , à comparer aux cellules de l'ordre du millimètre précédemment utilisées dans la littérature. De plus nous vérifierons que la part de l'énergie cinétique résolue soit suffisante pour s'assurer que le maillage soit bien adapté.

La très grande majorité des approches utilisées en LES Diesel reposent sur des schémas cinétiques réduits dont les capacités prédictives sont *a priori* insuffisantes. L'originalité de notre approche consiste à utiliser des schémas cinétiques détaillés, plus prédictifs sur l'ensemble des gammes de fonctionnement du moteur Diesel. Pour cela, le modèle ADF-PCM sera utilisé. Il permet de prédire l'auto-inflammation et la combustion non-prémélangée présentes dans les moteurs Diesel via la tabulation de flammes de diffusion approchées. Le temps de calcul requis pour résoudre ces flammelettes approchées est faible comparé à des flammelettes et, est de plus peu dépendant de la taille du schéma cinétique. Elles sont ainsi particulièrement avantageuses lorsque des schémas cinétiques détaillés sont nécessaires.

Enfin, notre travail consistera à valider l'approche choisie et plus particulièrement le modèle ADF-PCM sur des cas d'injections liquides auto-inflammantes en enceinte fermée. Ces configurations fournissent des mesures expérimentales plus précises que pour des cas moteurs. De plus de nombreuses mesures sont présentées aussi bien sur des cas réactifs que non réactifs. Cela nous permettra de valider tout d'abord le jet pour un cas non réactif et de vérifier les capacités de notre approche à reproduire l'injection liquide, l'évaporation et le mélange. Cette phase de vérification, pourtant nécessaire, n'est que rarement réalisable sur des cas moteurs. Le modèle de combustion ADF-PCM sera ensuite validé pour différents sprays. L'utilisation de sprays permettra de vérifier non seulement sa prédiction globale de la combustion (délai d'auto-inflammation, courbe de pression moyenne) mais aussi sa localisation (localisation de l'auto-inflammation, hauteur d'accrochage).



Chapitre 3

Équations LES diphasiques et réactives

L'injection directe du carburant liquide dans la chambre de combustion est réalisée pour des pressions élevées et va fortement influencer la dynamique des gaz. Lors de la simulation d'un moteur Diesel, il est donc nécessaire de décrire à la fois la dynamique de l'écoulement gazeux (phase porteuse), celle de l'écoulement liquide (phase dispersée) ainsi que les interactions réciproques entre ces deux phases. La dynamique des gaz est prédite par les équations de Navier-Stokes (Sect. 3.1). La phase dispersée est quant à elle décrite par une approche Eulérienne mésoscopique, dont les équations sont introduites dans la section 3.2. Dans ce chapitre, les termes liquides et gazeux seront différenciés par les indices l et g . Les chapitres suivant traitant quasi exclusivement de la phase gazeuse, cette notation ne sera pas utilisée. Seuls les termes liquides porteront l'indice l .

3.1 Modélisation de la phase porteuse

L'objectif de la LES est de résoudre les plus grandes structures turbulentes de l'écoulement et de modéliser les plus petites. Pour ce faire, chacune des quantités transportées (notée ici f) est filtrée par un filtre G de taille Δ :

$$\bar{f}(x, t) = \int f(x^*, t) G_{\Delta}(x - x^*) dx^* \quad (3.1)$$

La littérature fournit différents exemples pour le filtre G_{Δ} . Pour la plupart des codes LES comme AVBP, le filtrage n'est pas explicitement calculé suivant l'équation (3.1) mais effectué de façon implicite. C'est le volume de contrôle de la maille qui constitue l'élément de filtrage et le schéma numérique qui réalise un filtrage implicite. Le but de cette approche est d'obtenir une taille de filtre la plus réduite possible.

L'application d'un filtre de Reynolds aux équations de Navier-Stokes à masse volume variable complique le système par l'apparition de corrélations croisées grandeur f / masse volumique. De



façon à revenir à un système similaire au système initial, le filtrage de Favre est introduit :

$$\tilde{f} = \frac{\overline{f\rho_g}}{\bar{\rho}_g} \quad (3.2)$$

avec ρ_g la masse volumique du gaz. Les symboles $\bar{\cdot}$ et $\tilde{\cdot}$ représentent respectivement une variable filtrée au sens de Reynolds et au sens de Favre.

3.1.1 Équations de la phase porteuse

Nous considérons un gaz parfait composé de N espèces dont l'évolution est décrite par les équations réactives de Navier-Stokes (Poinsot and Veynante, 2011).

3.1.1.1 Conservation de la quantité de mouvement

L'équation de la quantité de mouvement filtrée s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_g \tilde{u}_{g,i}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}_g \tilde{u}_{g,i} \tilde{u}_{g,j}) = & - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{p} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij} - \bar{\tau}_{ij}^t) \\ & - \bar{F}_{drag} + \bar{\Gamma}_g \tilde{u}_{g,i} \end{aligned} \quad (3.3)$$

où δ désigne le symbole de Kronecker. Les termes \tilde{u}_g et \bar{p} représentent respectivement la vitesse filtrée du gaz et sa pression. Les termes d'évaporation $\bar{\Gamma}_g = -\bar{\Gamma}_l$ (Eq. 3.51) et de traînée \bar{F}_{drag} (Eq. 3.62) filtrés sont introduits dans la section 3.2.5. Les fermetures de la contrainte visqueuse filtrée $\bar{\tau}_{ij}$ et du transport convectif non-résolu $\bar{\tau}_{i,j}^t$ sont proposées dans la section 3.1.3.

3.1.1.2 Conservation des espèces

La fraction massique filtrée d'une espèce gazeuse $\tilde{Y}_{k=1,N}$ est transportée via l'équation suivante :

$$\frac{\partial \bar{\rho}_g \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho}_g \tilde{u}_{g,j} \tilde{Y}_k) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\bar{J}_{j,k} + \bar{J}_{j,k}^t] + \bar{\Gamma}_{g,k} + \bar{\rho}_g \tilde{\omega}_k \quad (3.4)$$

avec $\tilde{\omega}_k$ le taux de réaction de l'espèce k . Dans cette équation, quatre termes doivent être fermés. Le terme diffusif filtré des espèces $\bar{J}_{j,k}$ et le terme non résolu du transport convectif des espèces $\bar{J}_{j,k}^t$ sont explicités dans la section 3.1.3. La fermeture des taux de réaction sera obtenue grâce aux modèles de combustion détaillés dans la section 2.2. Finalement, le terme $\bar{\Gamma}_{g,k}$ est égal à $\bar{\Gamma}_g$ lorsque k représente le carburant. Il est nul dans les autres cas.

3.1.1.3 Conservation de l'énergie

L'énergie totale filtrée non chimique \tilde{E} est calculée via l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho}_g \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho}_g \tilde{u}_{g,j} \tilde{E} \right) = & - \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{u}_{g,i} \bar{p} \delta_{ij} - \tilde{u}_{g,i} \bar{\tau}_{ij} + \bar{q}_j + \bar{q}_j^t \right] \\ & + \bar{\rho}_g \tilde{\omega}_T + \bar{S}_E \end{aligned} \quad (3.5)$$

Le terme \bar{S}_E représente la contribution de la phase dispersée à l'équation de transport de l'énergie et s'écrit :

$$\bar{S}_E = \bar{\Lambda} + \bar{\Phi} + \frac{1}{2} \hat{u}_{l,i}^2 \bar{\Gamma}_g - \bar{F}_{drag} \hat{u}_{l,i} \quad (3.6)$$

avec \hat{u}_l la vitesse filtrée du liquide définie dans la section 3.2. Les termes $\bar{\Lambda}$ et $\bar{\Phi}$, représentant les échanges d'enthalpie entre la phase gazeuse et la phase liquide par évaporation et transfert de chaleur, sont décrits dans la section 3.2.5. Les termes \bar{F}_{drag} et $\frac{1}{2} \hat{u}_{l,i}^2 \bar{\Gamma}_g$ décrivent les forces de traînée et l'apport d'énergie cinétique à la phase gazeuse par évaporation. Le terme source $\tilde{\omega}_T$ représente l'apport d'enthalpie dû aux réactions chimiques des espèces. Il est défini à partir de l'enthalpie de formation des espèces $h_{f,k}^0$ (définie dans notre cas à la température de référence de 0 K) ainsi que de leur taux de réaction :

$$\tilde{\omega}_T = \sum_{k=1}^N h_{f,k}^0 \tilde{\omega}_k \quad (3.7)$$

Les fermetures des termes de diffusion thermique filtré \bar{q}_j et de transport non résolu $\bar{q}_j^t = -\bar{\rho}_g \left(\tilde{u}_{g,i} \tilde{E} - \tilde{u}_{g,i} \tilde{E} \right)$ sont décrites dans la section 3.1.3.

3.1.2 Modèle de sous-maille

3.1.2.1 Fermeture du tenseur de Reynolds de sous-maille

Les équations de Navier-Stokes ayant été filtrées, seule une partie du mouvement turbulent est résolue. Il est donc nécessaire d'introduire un modèle de turbulence, aussi appelé modèle de sous-maille de façon à décrire l'influence des plus petites structures. L'objectif de ce modèle consiste à fermer le tenseur de Reynolds de sous-maille $\bar{\tau}_{ij}^t = \bar{\rho}_g \left(\tilde{u}_{g,i} \tilde{u}_{g,j} - \tilde{u}_{g,i} \tilde{u}_{g,j} \right)$

Nous nous intéresserons ici uniquement aux fermetures utilisant l'hypothèse de Boussinesq selon laquelle il y a une dépendance linéaire entre les contraintes turbulentes et la vitesse de déformation. Sous ces conditions, le tenseur de Reynolds est modélisé comme :

$$\bar{\tau}_{ij}^t - \frac{1}{3} \bar{\tau}_{kk} \delta_{ij} = -2 \bar{\rho}_g \nu^t \left(\tilde{S}_{g,ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{g,kk} \delta_{ij} \right) \quad (3.8)$$



avec ν^t la viscosité turbulente du gaz. Le tenseur de contrainte $\tilde{S}_{g,ij}$ s'écrit :

$$\tilde{S}_{g,ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_{g,j}}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_{g,i}}{\partial x_j} \right) \quad (3.9)$$

En définissant l'énergie cinétique de la turbulence $k_{SGS} = \bar{\tau}_{kk}/2$ et en reformulant l'équation (3.8) nous obtenons :

$$\bar{\tau}_{ij}^t = -2\bar{\rho}_g \nu^t \left(\tilde{S}_{g,ij} - \frac{1}{3} \tilde{S}_{g,kk} \delta_{ij} \right) + \frac{2}{3} \bar{\rho}_g k_{SGS} \quad (3.10)$$

Cette approche revient à assimiler un flux convectif à l'échelle de la sous-maille à un flux diffusif grâce à l'introduction d'un terme de viscosité turbulente ν^t . De nombreux modèles sont dédiés à sa fermeture et de plus amples informations peuvent être obtenues dans des ouvrages spécifiques (Chassaing, 2000; Sagaut, 2005). Par la suite nous ne présenterons que le modèle de Smagorinsky (1963) utilisé lors des présents travaux.

3.1.2.2 Modèle de Smagorinsky

Le modèle de Smagorinsky (1963) a été initialement développé pour la simulation météorologique à partir du modèle de longueur de mélange de Prandtl. La viscosité turbulente est supposée proportionnelle au produit d'une longueur et d'une vitesse et s'exprime comme :

$$\nu^t = (C_s \Delta)^2 \sqrt{\tilde{S}_{g,ij} \tilde{S}_{g,ij}} \quad (3.11)$$

où Δ désigne la taille caractéristique du filtre estimée dans notre cas comme la racine cubique du volume de contrôle de la cellule. La valeur de la constante C_s dépend de la configuration étudiée. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, la valeur de C_s est estimée à 0,2 (Poinot and Veynante, 2011). Néanmoins, pour des cas de calculs de couches limites, des valeurs plus faibles (de l'ordre de 0,1) sont utilisées (Moin et al., 1991; Lesieur and Metais, 1996). Pour la présente étude, une valeur intermédiaire de 0,18 pour la constante du modèle sera retenue. Le modèle de Smagorinsky possède la spécificité de prédire le bon niveau de dissipation de l'énergie cinétique par les structures non-résolues de l'écoulement dans des cas de turbulence homogène isotrope (Sagaut, 2005). Il possède de plus l'avantage majeur d'être simple à implanter et a été largement utilisé pour les calculs industriels grâce à sa robustesse et son faible surcoût en temps de calcul. Cependant il a tendance à surestimer la viscosité turbulente pour des configurations d'écoulements cisailés et d'interactions fluide / parois (Sagaut, 2005).

3.1.3 Termes non fermés résultants du filtrage des équations de Navier-Stokes

Pour les équations de transport de l'énergie et des espèces, deux jeux de termes sont à fermer : les termes diffusifs résolus et les termes convectifs de sous-maille, auxquels s'ajoute le tenseur

des contraintes.

3.1.3.1 Modélisation des termes diffusifs résolus

Le terme de diffusion filtré des espèces est calculé par l'approche de [Hirschfelder et al. \(1969\)](#). L'intérêt de cette méthode est qu'elle permet de mimer une diffusion multi-espèces complète en considérant la diffusivité de chaque espèce dans le mélange. Le flux diffusif est calculé avec la vitesse de diffusion $V_{i,k}$ de l'espèce k dans la direction i :

$$\tilde{Y}_k \tilde{V}_{i,k} = -D_k \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \frac{W_k}{W} \quad (3.12)$$

où X_k désigne la fraction molaire de l'espèce k , W_k sa masse molaire, D_k son coefficient de diffusion (supposé constant à l'échelle de la cellule) et W la masse molaire du mélange. La somme de toutes les espèces de l'équation (3.12) n'est pas obligatoirement nulle et ne respecte donc pas la conservation de la masse. Une vitesse de correction \tilde{V}_i^c est donc introduite :

$$\tilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \frac{W_k}{W} \quad (3.13)$$

Au final, le terme de diffusion filtré des espèces $\bar{J}_{i,k}$ s'exprime comme :

$$\bar{J}_{i,k} = \bar{\rho}_g \left(D_k \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \frac{W_k}{W} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \quad (3.14)$$

Le flux diffusif filtré de chaleur \bar{q}_i s'écrit :

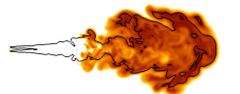
$$\bar{q}_i = -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j} + \sum_{k=1}^N \bar{J}_{i,k} \tilde{h}_{s,k} \quad (3.15)$$

avec $\tilde{h}_{s,k}$ l'enthalpie sensible filtrée de l'espèce k tabulée dans le code CFD pour différentes températures. Le coefficient de conduction thermique filtré s'exprime quant à lui comme :

$$\bar{\lambda} = \bar{\rho}_g \bar{C}_p \frac{\bar{\nu}}{\text{Pr}} \quad (3.16)$$

où Pr désigne le nombre de Prandtl, fixé à 0,75, représentant le rapport entre la diffusion de quantité de mouvement et la diffusion thermique. La viscosité moléculaire cinématique filtrée $\bar{\nu}$ est déterminée par une loi de [Sutherland \(1893\)](#) faisant l'hypothèse que la viscosité est indépendante de la composition du gaz et proche de celle de l'air. Elle s'écrit :

$$\bar{\nu} = \frac{c_1}{\bar{\rho}_g} \frac{T^{3/2}}{\tilde{T} + c_2} \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{3/2}} \quad (3.17)$$



avec $c_1 = 1.71 \cdot 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1}.\text{s}^{-1}$, $c_2 = 110,4\text{K}$ et $T_{ref} = 273\text{K}$ (Williams, 1985).

Enfin, la capacité calorifique filtrée du mélange \bar{C}_p s'exprime comme :

$$\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k C_p^k(T) = \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \quad (3.18)$$

3.1.3.2 Modélisation des termes convectifs de sous-maille

De façon à modéliser les flux convectifs de sous-maille des espèces (Eq. 3.4) et de l'énergie (Eq. 3.5), nous utilisons une approche de type gradient basée sur l'hypothèse de Boussinesq. Ces flux prennent ainsi la forme de flux diffusifs, s'écrivant de façon similaire à une loi de Fick.

$$\bar{J}_{i,k}^t = -\bar{\rho}_g \left(\widetilde{u_{g,i} Y_k} - \tilde{u}_{g,i} \tilde{Y}_k \right) = \bar{\rho}_g D_k^t \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (3.19)$$

$$\bar{q}_j^t = -\bar{\rho}_g \left(\widetilde{u_{g,i} E} - \tilde{u}_{g,i} \tilde{E} \right) = -\lambda^t \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \bar{J}_{i,k}^t \tilde{h}_{s,k} \quad (3.20)$$

Les coefficients de diffusion massiques D_k^t et thermiques λ^t sont déterminés grâce à la viscosité turbulente ν^t calculée par le modèle de turbulence.

$$\lambda^t = \bar{\rho}_g \bar{C}_p \frac{\nu^t}{\text{Pr}^t} \quad (3.21)$$

$$D_k^t = \frac{\nu^t}{\text{Sc}^t} \quad (3.22)$$

Les nombres de Prandtl et Schmidt turbulents Pr^t et Sc^t sont choisis égaux à 0,6.

3.1.3.3 Modélisation du tenseur des contraintes visqueuses

Finalement, le tenseur filtré des contraintes visqueuses est calculé comme :

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\bar{\rho}_g \bar{\nu} \left(\tilde{S}_{g,ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{g,ll} \right) \quad (3.23)$$

3.2 Modélisation de la phase dispersée

L'approche mésoscopique Eulérienne initialement développée par [Fevrier et al. \(2005\)](#) pour la simulation de la phase liquide est utilisée. Elle fait l'hypothèse de gouttes sphériques indéformables dispersées et n'interagissant pas entre-elles. Cette dernière hypothèse est levée par l'ajout

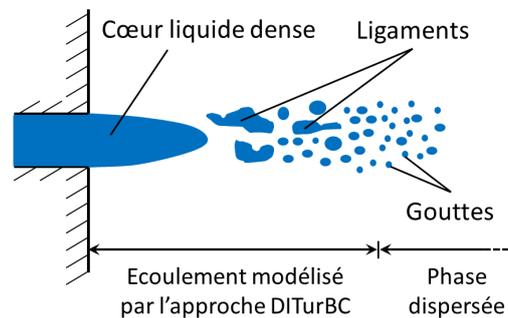


FIGURE 3.1 – Schéma de l'atomisation d'un spray liquide.

d'un modèle de collision (Boelle et al., 1995) de façon à étendre ce formalisme à des sprays plus denses. Néanmoins, la physique du spray Diesel, schématisée par la figure 3.1 reste très éloignée de ces hypothèses.

Le cœur liquide initialement présent à la sortie de l'injecteur va se disloquer en ligaments puis en gouttes. De façon à s'affranchir de la simulation de cette zone proche de l'injecteur, des phénomènes physiques qui s'y déroulent (atomisation primaire, cavitation) et des difficultés numériques qu'elle engendre (résolution du cisaillement gaz - liquide) le modèle DITurBC (Martinez et al., 2010) est introduit. Il permet de déplacer la condition aux limites de l'injection en aval de celui-ci, comme présenté schématiquement sur la figure 3.2. La zone entre l'injection et le modèle DITurBC n'est donc pas simulée. Les profils de toutes les variables, imposés par la condition aux limites, sont reconstruits à partir de corrélations reposant sur les paramètres de l'injecteur, la pression d'injection et les conditions thermodynamiques dans la chambre de combustion.

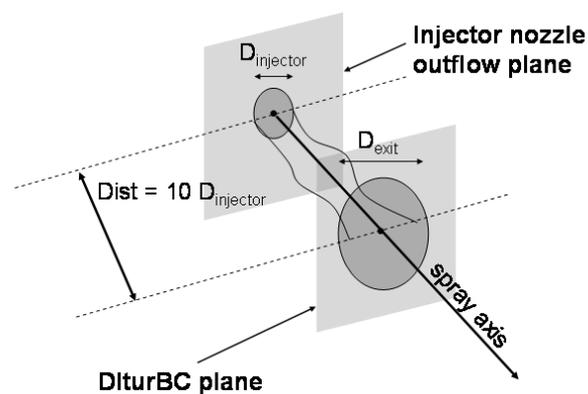
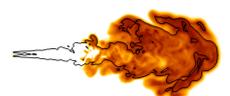


FIGURE 3.2 – Schéma de principe du modèle DITurBC.



3.2.1 Formalisme mésoscopique Eulérien

Dans un nuage de particules, d'importantes différences de vitesse peuvent être observées pour deux particules très proches. La vitesse instantanée $u_p^{(b)}(t)$ d'une particule b à la position $x^{(b)}(t)$ peut être décomposée en deux composantes (comme illustré par la figure 3.3) : une vitesse Eulérienne statistique partagée par toutes les particules (la vitesse corrélée $\widehat{u}_l(x, t)$ aussi appelée vitesse mésoscopique Eulérienne) et une vitesse résiduelle spécifique à la particule (vitesse décorrélée ou RUM) $\delta u_p^{(b)}(t)$:

$$u_p^{(b)}(t) = \widehat{u}_l(x^{(b)}(t), t) + \delta u_p^{(b)}(t) \quad (3.24)$$

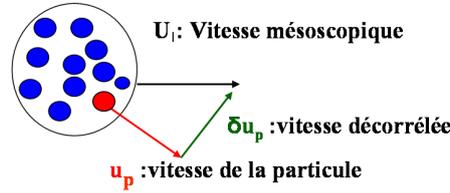


FIGURE 3.3 – Présentation de la vitesse mésoscopique (ou vitesse corrélée) et de la vitesse décorrélée en comparaison avec la vitesse particulaire.

La contribution du RUM est décrite par une fonction densité de probabilité conditionnée sur une réalisation de la phase porteuse. Le principe pour le développement d'une équation de transport liquide Eulérienne est similaire à la dérivation des équations de Navier-Stokes à partir de la théorie cinétique des gaz (Chapman and Cowling, 1939). Ces équations sont obtenues en intégrant dans l'espace des phases les équations de Boltzmann (Fevrier et al., 2005; Moreau, 2005).

Ces équations sont ensuite filtrées de façon à obtenir les équations Eulérienne LES de la phase liquide. L'opérateur de Favre est similaire à celui utilisé pour la phase porteuse (Eq. 3.1) à ceci près que la densité du gaz ρ_g est remplacée par le nombre de gouttes par unité de volume n_l .

$$\bar{n}_l \widehat{f}(x) = \int n_l f(x) G_\Delta(x^* - x) dx^* \quad (3.25)$$

Nous obtenons ainsi les équations de conservation du nombre de gouttes par unité de volume et de la masse :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{n}_l + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{n}_l \widehat{u}_{l,j} = 0 \quad (3.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}_l \bar{\alpha}_l + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho}_l \bar{\alpha}_l \widehat{u}_{l,i} = -\bar{\Gamma}_g \quad (3.27)$$

avec d le diamètre des gouttes et $\bar{\rho}_l$ la densité filtrée du liquide considérée constante. Le terme d'évaporation $\bar{\Gamma}_g$ est modélisé selon l'approche proposée par Spalding (1953). Elle fait l'hypothèse de gouttes sphériques à iso-température et utilise une relation de Clausius-Clapeyron pour

l'interface liquide-gaz. La fraction volumique filtrée de liquide est définie comme $\bar{\alpha}_l = \bar{n}_l \pi d^3 / 6$. L'équation de transport filtrée de la quantité de mouvement du liquide s'écrit :

$$\frac{\partial}{\partial t} \bar{\rho}_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho}_l \bar{\alpha}_l \hat{u}_{l,i} \hat{u}_{l,j} = \bar{F}_{drag} - \frac{\partial}{\partial x_j} \mathbb{T}_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{\delta \Sigma}_{ij} \quad (3.28)$$

\mathbb{T}_{ij} est le tenseur de contrainte de sous-maille et $\widehat{\delta \Sigma}_{ij}$ est le flux du tenseur de déformation s'écrivant :

$$\widehat{\delta \Sigma}_{ij} = -\frac{2}{3} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta \theta} \delta_{ij} - \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta R}_{ij}^* \quad (3.29)$$

Celui-ci est basé sur la partie déviatorique du tenseur de vitesse décorrélé (RUM) $\widehat{\delta R}_{ij}^*$ ainsi que sur le tenseur d'énergie décorrélé (RUE pour Random Uncorrelated Energy) $\widehat{\delta \theta}$ défini comme la moitié de la trace du tenseur RUM (Simonin, 2002; Kaufmann, 2004). Une équation de transport est introduite pour le RUE :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta \theta} + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta \theta} \hat{u}_{l,i} = & - 2 \frac{\bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l}{\tau_p} \widehat{\delta \theta} - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta K}_{ij} \\ & + \widehat{\delta \Sigma}_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \hat{u}_{l,i} + \Pi_{\delta \theta_l} \end{aligned} \quad (3.30)$$

Le premier terme de la partie de droite concerne les pertes de RUE dues aux forces de traînée puisque les particules influencées par la phase porteuse tendent à avoir la même vitesse. Le second terme est un terme de diffusion et le troisième est un terme de production dû au cisaillement et à la compression. Le quatrième terme décrit la production de RUE par le mouvement de sous-maille.

3.2.2 Modèles pour la fermeture du mouvement décorrélé

Le tenseur RUM $\widehat{\delta R}_{ij}^*$ et le terme $\widehat{\delta K}_{ij}$ de l'équation 3.30 sont respectivement fermés par une hypothèse de viscosité et un terme de diffusion similaire à une loi de Fick (Kaufmann, 2004).

$$\begin{aligned} \widehat{\delta R}_{ij}^* &= -2 \widehat{\nu}_{RUM} \left(\hat{S}_{ij} - \frac{\hat{S}_{l,mm} \delta_{ij}}{3} \right) \\ &= -2 \widehat{\nu}_{RUM} \hat{S}_{l,ij} \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\widehat{\delta K}_{ij} = -\hat{\kappa}_{RUM} \frac{\partial \widehat{\delta \theta}}{\partial x_j} \quad (3.32)$$

avec $\hat{S}_{l,ij}$ le tenseur des contraintes de sous-maille défini comme :

$$\hat{S}_{l,ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \hat{u}_{l,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial \hat{u}_{l,j}}{\partial x_i} \right) \quad (3.33)$$



La viscosité $\widehat{\nu}_{RUM}$ et le coefficient de diffusion $\widehat{\kappa}_{RUM}$ sont modélisés comme :

$$\widehat{\nu}_{RUM} = \frac{1}{3}\tau_p\widehat{\delta\theta} \quad (3.34)$$

$$\widehat{\kappa}_{RUM} = \frac{10}{27}\tau_p\widehat{\delta\theta} \quad (3.35)$$

avec τ_p le nombre de Stokes caractéristique décrit dans la section 3.2.5

Ces fermetures ont été validées *a priori* dans une étude basée sur une configuration de turbulence homogène isotrope diphasique (Moreau, 2005).

3.2.3 Modèles pour la fermeture du terme de sous-maille

La fermeture des termes de sous-maille est réalisée selon les approches proposées par Moreau (2005) et Riber et al. (2005). Du fait de la compressibilité importante de la phase dispersée, le tenseur de sous-maille \mathbb{T}_{ij} (Eq. 3.28) est décomposé en deux parties : la partie diagonale du tenseur, équivalente à une pression de sous-maille P_{sgs} proportionnelle à l'énergie de sous-maille et la partie non-diagonale équivalente à un tenseur visqueux de sous-maille \mathbb{T}_{ij}^* :

$$\mathbb{T}_{ij} = \underbrace{C_l 2\Delta^2 \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l |\hat{S}_l|^2 \delta_{ij}}_{P_{SGS}} - \underbrace{C_m 2\Delta^2 \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l |\hat{S}_l| \left(\hat{S}_{l,ij} - \frac{\delta_{ij}}{3} \hat{S}_{l,kk} \right)}_{\mathbb{T}_{ij}^*} \quad (3.36)$$

avec $|\hat{S}_l|^2 = 2\hat{S}_{l,ij}\hat{S}_{l,ij}$. Ces modèles ont été validés sur une configuration de turbulence homogène isotrope diphasique (Moreau, 2005) pour laquelle les valeurs des constantes C_l et C_m ont été respectivement évaluées à 0,012 et 0,02. La production de RUE par la sous-maille $\Pi_{\delta\theta_l}$ est obtenue en faisant l'hypothèse que l'énergie corrélée dissipée par les échelles de sous-maille est totalement convertie en RUE. De plus, la traînée est négligeable (Riber et al., 2006). La production de RUE s'écrit donc :

$$\Pi_{\delta\theta} \approx -\mathbb{T}_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{u}_{l,i} \quad (3.37)$$

3.2.4 Extension aux sprays denses : effets de collisions

La fermeture des termes du RUM est liée à la traînée. Dans un cas sans collisions, la création ou la destruction du RUM est due aux interactions entre la phase porteuse et la phase dispersée. Par exemple, des gouttes de petite taille auront très rapidement des vitesses similaires à celle de la phase porteuse, provoquant une baisse du RUE. D'autre part, le RUM peut être produit par des couches de cisaillement ou des phénomènes de compression.

La traînée est l'effet prédominant dans l'évolution du RUM. Cette hypothèse reste valide lorsque le temps de relaxation est petit devant les autres temps caractéristiques de la phase dispersée.

Dans la zone de spray dense à proximité de l'injecteur, le temps caractéristique de collision peut être plus petit que le temps de relaxation. Cela signifie que les gouttes n'ont pas le temps d'être influencées par la phase porteuse. Il est donc nécessaire d'adapter les équations de fermeture du RUM pour prendre en compte les collisions. Celles-ci sont considérées comme binaires, inélastiques et rebondissantes. De ce fait, les phénomènes de coalescence ne sont pas pris en compte. Cette hypothèse peut paraître forte dans le cadre de sprays non-évaporants pour lesquels les phénomènes de coalescence restent présents loin dans le jet et peuvent induire une augmentation du rayon moyen des gouttes. Néanmoins, dans le cas de sprays évaporants dans des conditions typiques d'un moteur Diesel, le temps caractéristique d'évaporation est si faible que la coalescence est négligeable.

L'approche utilisée ici a été développée et validée dans une configuration d'écoulement cisailé fortement chargé (Boelle et al., 1995). Le principe et les développements des modèles est présenté dans Peirano and Leckner (1998). Le temps de collision (Chapman and Cowling, 1939) s'écrit :

$$\tau_c = \frac{d}{24g_0\bar{\alpha}_l} \sqrt{\frac{3\pi}{2\widehat{\delta\theta}_l}} \quad \text{with} \quad g_0 = \left(1 - \frac{\bar{\alpha}_l}{\alpha_m}\right)^{-2.5\alpha_m} \quad (3.38)$$

où g_0 est la fonction de résolution radiale (Lun and Savage, 1986) avec $\alpha_m = 0,6$. Les effets de collision changent la modélisation des termes de viscosité et de diffusion définis dans les équations (3.34) et (3.35) pour introduire le temps de collision. L'indice c est ici utilisé pour définir les termes corrigés visqueux et diffusifs.

$$\widehat{\nu}_{RUM_c} = \frac{\tau_p \widehat{\delta\theta}}{3} \left(1 + \bar{\alpha}_l g_0 \frac{2}{5} (1+e)(3e-1)\right) \frac{1}{\left(1 + \frac{\tau_p (1+e)(3-e)}{10\tau_c}\right)} \quad (3.39)$$

$$\widehat{\kappa}_{RUM_c} = \frac{2}{3} \widehat{\delta\theta}_l \frac{(1 + \bar{\alpha}_l g_0 \frac{3}{5} (1+e)^2 (2e-1))}{\left(\frac{9}{5\tau_p} + \frac{(19-33e)(1+e)}{100\tau_c}\right)} \quad (3.40)$$

L'influence du coefficient de restitution e (égal à une valeur fixée arbitrairement à 0,9) sur le tenseur des contraintes a déjà été investiguée par différents auteurs (Campbell, 1989; Hopkins and Louge, 1991). D'autres termes sont influencés par la prise en compte des collisions : le tenseur de contraintes collisionnelles $\widehat{\delta K}_{ij}^{coll}$ et le terme de diffusion collisionnelle $\widehat{\delta \Sigma}_{ij}^{coll}$. Tout comme les termes cinétiques $\widehat{\delta K}_{ij}$ et $\widehat{\delta \Sigma}_{ij}$, les termes collisionnels sont respectivement fermés par une approche de type Boussinesq et un terme de dissipation similaire à une loi de Fick :

$$\widehat{\delta \Sigma}_{ij}^{coll} = - \left(\widehat{P}_{coll} - \widehat{\xi}_c \frac{\widehat{S}_{l,kk}}{3} \right) \delta_{ij} + 2\bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\nu}_{coll} \widehat{S}_{l,ij}^* \quad (3.41)$$

$$\widehat{\delta K}_{ij}^{coll} = -\widehat{\kappa}_{coll} \frac{\partial \widehat{\delta\theta}_l}{\partial x_j} \quad (3.42)$$



avec $\widehat{\nu}_{coll}$ la viscosité collisionnelle (Boelle et al., 1995) :

$$\widehat{\nu}_{coll} = \left(\frac{4}{5} \bar{\alpha}_l g_0 (1+e) \left(\widehat{\nu}_{RUM_c} + d \sqrt{\frac{2\widehat{\delta\theta}}{3\pi}} \right) \right) \quad (3.43)$$

$\widehat{\kappa}_{coll}$ la diffusion collisionnelle :

$$\widehat{\kappa}_{coll} = \bar{\alpha}_l g_0 (1+e) \left(\frac{6}{5} \kappa_{RUM_c} + \frac{4}{3} d \sqrt{\frac{2\widehat{\delta\theta}}{3\pi}} \right) \quad (3.44)$$

\widehat{P}_{coll} la pression collisionnelle

$$\widehat{P}_{coll} = \frac{4}{3} \bar{\alpha}_l^2 \bar{\rho}_l g_0 (1+e) \widehat{\delta\theta} \quad (3.45)$$

et $\widehat{\xi}_c$ la *bulk viscosity* :

$$\widehat{\xi}_c = \frac{4}{3} \bar{\alpha}_l^2 \bar{\rho}_l g_0 (1+e) d \sqrt{\frac{2\widehat{\delta\theta}}{3\pi}} \quad (3.46)$$

Les fermetures pour le tenseur des contraintes et le tenseur diffusif prenant en compte les collisions s'écrivent :

$$\begin{aligned} \widehat{\delta\Sigma}_{ij}^{tot} &= - \left(\widehat{P}_{RUM} + \widehat{P}_{coll} - \widehat{\xi}_c \frac{\widehat{S}_{l,kk}}{3} \right) \delta_{ij} \\ &\quad + 2\bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l (\widehat{\nu}_{RUM_c} + \widehat{\nu}_{coll}) \widehat{S}_{l,ij}^* \end{aligned} \quad (3.47)$$

$$\widehat{\delta K}_{ij}^{tot} = - (\widehat{\kappa}_{RUM_c} + \widehat{\kappa}_{coll}) \frac{\partial \widehat{\delta\theta}}{\partial x_j} \quad (3.48)$$

Au final, l'équation de transport de la quantité de mouvement du liquide (Eq. 3.28) s'écrit :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{u}_{l,i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{u}_{l,i} \widehat{u}_{l,j} &= \frac{\bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l}{\tau_p} (\widehat{u}_{g,i} - \widehat{u}_{l,i}) - \frac{\partial}{\partial x_j} \mathbb{T}_{ij}^* \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} P_{SGS} - \frac{\partial}{\partial x_i} \widehat{P}_{RUM} \\ &\quad - \frac{\partial}{\partial x_i} \widehat{P}_{coll} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\widehat{\xi}_c \frac{\partial u_{l,k}}{\partial x_k} \right) \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial x_j} 2\bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l (\widehat{\nu}_{RUM_c} + \widehat{\nu}_{coll}) S_{l,ij}^* \\ &\quad + \bar{\Gamma}_l \widehat{u}_{l,i} \end{aligned} \quad (3.49)$$

et l'équation de transport (Eq. 3.30) pour le RUE s'écrit :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta\theta} + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta\theta} \widehat{u}_{l,i} &= -2 \frac{\bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l}{\tau_p} \widehat{\delta\theta} - \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \frac{1-e^2}{3\tau_c} \widehat{\delta\theta} \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\alpha}_l \bar{\rho}_l \widehat{\delta K}_{ij}^{tot} + \widehat{\delta \Sigma}_{ij}^{tot} \frac{\partial}{\partial x_j} \widehat{u}_{l,i} \\
&\quad + \Pi_{\delta\theta} + \widehat{\delta\theta} \bar{\Gamma}_l
\end{aligned} \tag{3.50}$$

Ce modèle peut être vu comme une extension du modèle initial. Lorsque la fraction volumique de liquide tend vers zéro, le temps caractéristique collisionnel tend vers l'infini et les termes de collision (Eq. 3.43 ; 3.44 ; 3.45 ; 3.46) tendent vers zéro. De plus, les termes cinématiques (Eq. 3.39 ; 3.40) tendent vers leur expression originale sans les effets collisionnels. Ce modèle a été validé sur un cas de turbulence homogène isotrope chargé en particules (Vié, 2009) et a été appliqué à un spray Diesel dans des conditions moteurs (Martinez et al., 2009).

3.2.5 Termes de couplages gaz - liquide

Les termes de couplage entre le liquide et le gaz sont explicités dans cette section. Ceux-ci font l'hypothèse que chaque goutte possède une conductivité thermique infinie. Ainsi, leurs températures respectives sont considérées homogènes.

3.2.5.1 Échanges de masse

L'apport de masse de la phase liquide vers la phase gazeuse résultant de l'évaporation des gouttes est décrit par le terme d'évaporation $\bar{\Gamma}$. Celui-ci est modélisé suivant (AVBP, 2008) :

$$\bar{\Gamma} = \pi \bar{n}_l d \bar{\text{Sh}} \frac{\bar{\mu}}{\text{Sc}} \ln(1 + \bar{B}_M) \tag{3.51}$$

avec $\bar{\text{Sh}}$ le nombre de Sherwood et \bar{B}_M le nombre massique de Spalding.

Le nombre de Sherwood est un nombre adimensionné qui représente le rapport entre les transports massiques convectifs et diffusifs. Il s'écrit :

$$\bar{\text{Sh}} = 2 + 0,55 \bar{Re}_p^{1/2} \text{Sc}^{1/3} \tag{3.52}$$

avec \bar{Re}_p le nombre de Reynolds d'une particule liquide :

$$\bar{Re}_p = \frac{|\tilde{u}_g - \widehat{u}_l| d}{\bar{\nu}} \tag{3.53}$$

Le nombre adimensionnel massique de Spalding est fonction de la différence des fractions massiques de carburant entre l'interface liquide ζ à la température T_l et une zone située infiniment



loin de cette première (pour laquelle la quantité de carburant peut être supposée égale à \tilde{Y}_F) :

$$\bar{B}_M = \frac{Y_{F,\zeta}(T_l) - \tilde{Y}_F}{1 - Y_{F,\zeta}(T_l)} \quad (3.54)$$

avec $Y_{F,\zeta}$ défini à partir de la fraction molaire $X_{F,\zeta}$ comme :

$$Y_{F,\zeta} = \frac{X_{F,\zeta}W_F}{X_{F,\zeta}W_F + (1 - X_{F,\zeta})\bar{W}_{nF,\zeta}} \quad (3.55)$$

W_F représente la masse molaire du carburant et $\bar{W}_{nF,\zeta}$ la masse molaire restante du pseudo-mélange constitué dans toutes les autres espèces excepté le carburant. En supposant que la composition de ce pseudo-mélange ne change pas entre ζ et ∞ , nous obtenons :

$$\bar{W}_{nF,\zeta} = \bar{W}_{nF,\infty} = \frac{1 - \tilde{Y}_F}{1 - \tilde{Y}_F \frac{W}{W_F}} \quad (3.56)$$

$X_{F,\zeta}$ est calculé par la loi de Dalton pour un mélange de gaz parfaits :

$$X_{F,\zeta} = \frac{P_{F,\zeta}}{\bar{p}} \quad (3.57)$$

avec $P_{F,\zeta}$ la pression partielle d'un carburant gazeux donnée par la relation de Clausius-Clapeyron :

$$P_{F,\zeta} = P_{cc} \exp\left(\frac{W_F L_v}{\mathcal{R}} \left(\frac{1}{T_{cc}} - \frac{1}{T_\zeta}\right)\right) \quad (3.58)$$

Celle-ci introduit la chaleur latente de vaporisation L_v , ainsi que les termes P_{cc} et T_{cc} représentant respectivement la pression et la température de référence correspondant à un point de la courbe de saturation en carburant. Au final, la température à l'interface T_ζ est considérée égale à la température liquide T_l .

Échanges enthalpiques

Les échanges enthalpiques entre les phases liquides et gazeuses sont décrits par les termes $\bar{\Lambda}$ et $\bar{\Phi}$. Le terme $\bar{\Lambda}$ représente les transferts d'enthalpie liés à l'évaporation du liquide et s'écrit :

$$\bar{\Lambda} = \bar{\Gamma} h_{s,F}(T_l) \quad (3.59)$$

avec $h_{s,F}(T_l)$ l'enthalpie sensible du liquide à la température de référence T_l . Le terme $\bar{\Phi}$ représente quant à lui les échanges enthalpiques par conduction entre les deux phases et s'écrit :

$$\bar{\Phi} = \pi \bar{n}_l d \bar{\text{Nu}} \bar{\lambda} (T_l - \tilde{T}) \quad (3.60)$$

avec $\overline{\text{Nu}}$ le nombre adimensionnel de Nusselt. Il représente le rapport entre les flux thermiques totaux et par conduction est se modélise comme :

$$\overline{\text{Nu}} = 2 + 0,55\overline{Re}_p^{1/2} \text{Pr} \quad (3.61)$$

Terme de traînée

La force de traînée filtrée \overline{F}_{drag} permet de prendre en compte l'interaction réciproque des quantités de mouvement du liquide et du gaz :

$$\overline{F}_{drag} = \frac{\overline{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\tilde{u}_{g,i} - \hat{u}_{l,i}) \quad (3.62)$$

avec τ_p le temps de Stokes caractéristique s'exprimant selon :

$$\tau_p = \frac{4 \bar{\rho}_l}{3 \bar{\rho}_g} \frac{d}{C_D |V_r|} \quad (3.63)$$

Le coefficient de traînée C_D est modélisé selon (Andrews and O'Rourke, 1996) :

$$C_D = \frac{24}{\overline{Re}_p} \left(\overline{\alpha}_g^{-2,65} + 0,15\overline{Re}_p^{0,687} \overline{\alpha}_g^{-1,87} \right) \quad (3.64)$$

avec $\overline{\alpha}_g = 1 - \overline{\alpha}_l$ la fraction volumique du gaz.



Chapitre 4

Modèles de flammelettes instationnaires

L'hypothèse de flammelette (Sect. 2.2) suppose qu'une flamme turbulente peut être vue comme un ensemble de flammes laminaires convectées et étirées par l'écoulement. Cette hypothèse est à la base de nombreux modèles de combustion non-prémélangée comme RIF (Pitsch et al., 1995), FPV (Pierce and Moin, 2004) ou encore ADF-PCM (Michel et al., 2009b). Ces approches utilisent des flammes de diffusion laminaires, en configuration de contre-courant, présentées dans la section 4.1. Les flammes de diffusion approchées (ADF) (Michel et al., 2008) utilisées dans le modèle ADF-PCM et permettant un important gain en temps de calcul par rapport aux flammelettes introduites dans la section précédente sont ensuite présentées (Sect. 4.2). Enfin, la section 4.3 a pour but la validation de ces flammes approchées dans des conditions caractéristiques du moteur Diesel. Elle compare, sur plusieurs exemples, le comportement et la structure des flammes de diffusion approchées avec des flammelettes calculées à l'aide du logiciel Cosilab (2010).

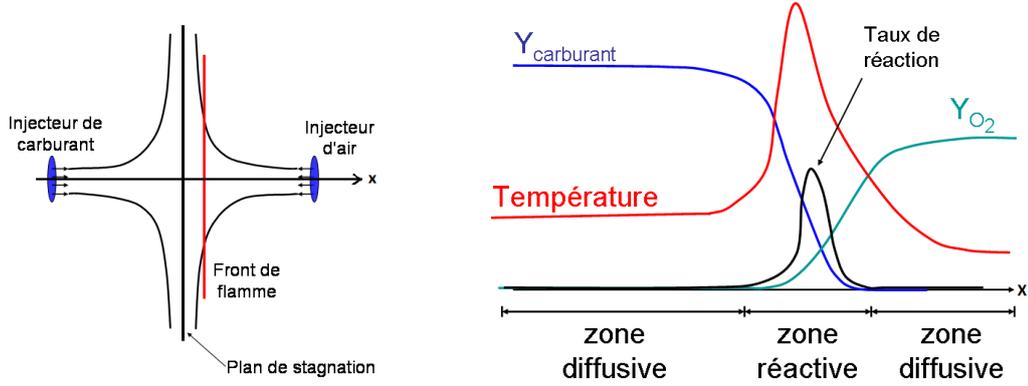
4.1 Flamme de diffusion laminaire à contre-courant

Une flamme de diffusion à contre-courant se caractérise par l'injection opposée du carburant et de l'oxydant, comme le présente la figure 4.1(a). Le carburant est ici injecté à gauche et l'oxydant à droite. Les deux jets impactent le long du plan de stagnation. La figure 4.1(b) présente la structure d'une flamme à contre-courant le long de l'axe d'injection. La combustion se développe lorsque le carburant et l'oxygène sont mélangés, préférentiellement pour les proportions proches de la stœchiométrie.

Dans cette configuration, il n'y a pas de propagation de la flamme, celle-ci étant entourée de zones soit très riches soit très pauvres. C'est la diffusion qui va permettre le mélange entre le carburant et l'oxydant. La température et les espèces produites vont ensuite diffuser de part et d'autre de la zone réactive.

Les flammes de diffusion sont souvent décrites par la fraction de mélange Z pouvant être vue





(a) Schéma d'une flamme de diffusion à contre courant dans l'espace physique. (b) Structure, sur l'axe, d'une flamme de diffusion.

comme une richesse normalisée entre 0 et 1. De façon à la définir, nous considérons l'équation chimique simplifiée suivante :



avec ν_F , ν_O et ν_P les coefficients stœchiométriques massiques respectifs du carburant, de l'oxygène et des produits de combustion. La fraction massique Y_k de chaque espèce suit l'équation de transport suivante :

$$\frac{\partial \rho Y_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_k) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right) + \rho \dot{\omega}_k \quad (4.2)$$

avec le coefficient de diffusion D considéré identique pour toutes les espèces. La loi de conservation impose que $\nu_F \dot{\omega}_F + \nu_O \dot{\omega}_O - \nu_P \dot{\omega}_P = 0$. En définissant la quantité $Z_0 = \nu_F Y_F + \nu_O Y_O - \nu_P Y_P$, on obtient alors l'équation de transport d'une grandeur sans terme source. En la normalisant entre 0 pour l'air et 1 pour le carburant, on obtient la fraction de mélange Z dont l'équation de transport s'écrit :

$$\frac{\partial \rho Z}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Z) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D \frac{\partial Z}{\partial x_i} \right) \quad (4.3)$$

Au lieu de représenter la flamme de diffusion dans l'espace physique, il est possible de la représenter dans l'espace de la fraction de mélange. Moyennant certaines hypothèses (Peters, 1984) il est possible d'exprimer la flamme de diffusion dans cet espace à partir de seulement deux paramètres, la fraction de mélange et le temps. Les hypothèses sont les suivantes :

- La diffusion des espèces dans les directions perpendiculaires au gradient de la fraction de mélange est supposé négligeable devant la diffusion des espèces dans la direction du gradient de la fraction de mélange.
- Les coefficients de diffusion D_k des espèces sont considérés égaux à celui de la température D . Ainsi, une loi de Fick est utilisée pour le calcul de la diffusion des espèces et une loi de Fourier

pour la température. Cela revient à imposer les nombres de Lewis des espèces et le nombre de Prandtl égaux à 1.

- La capacité calorifique C_p est considérée identique pour toutes les espèces et indépendante de la température.
- La densité ρ est considérée constante.

Dans ces conditions, l'équation de transport des fractions massiques des espèces s'écrit (Peters, 1988) :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_k \quad (4.4)$$

Une équation similaire peut être obtenue pour la température :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_T \quad (4.5)$$

Ces équations (Eq. 4.4, 4.5) sont appelées équations de flammelettes. L'effet du nombre de Lewis peut être pris en compte via l'utilisation de flammelettes étendues (Pitsch and Peters, 1998). Dans ces équations, le terme de dérivée seconde représente la diffusion (des espèces ou de la température), $\dot{\omega}_k$ le taux de réaction des espèces et $\dot{\omega}_T$ le dégagement de chaleur. Le taux de dissipation scalaire χ s'écrit :

$$\chi = D|\nabla Z|^2 \quad (4.6)$$

Ce terme, dont l'unité est l'inverse d'un temps, est basé sur le gradient de Z et contrôle la diffusion. Il est à noter que plusieurs définitions de χ sont utilisées dans la littérature, faisant intervenir soit un facteur ρ soit un facteur 2. La dissipation scalaire peut être explicitement calculée pour des configurations simples. Ainsi, pour des flammes laminaires étirées à contre-courant où la densité est supposée constante, elle s'écrit (Peters, 2000) :

$$\chi = \frac{a}{2\pi} \exp\left(-2[\operatorname{erf}^{-1}(1-2Z)]^2\right) \quad (4.7)$$

où a désigne l'étirement. Une flamme de diffusion peut donc être caractérisée soit par l'étirement soit par la dissipation scalaire pour une valeur de Z (généralement choisie à la stoechiométrie). Dans la suite de ce travail, nous nous servirons de l'étirement a de façon à être cohérent avec le code de flammelettes Cosilab que nous utiliserons par la suite.

L'étirement possède une forte influence sur le comportement d'une flamme de diffusion. Pour l'illustrer la figure 4.1 présente de façon schématique l'évolution du dégagement de chaleur d'une flamme de diffusion en fonction de l'inverse de l'étirement. On peut distinguer trois zones caractéristiques :

- La zone A est caractérisée par de très forts étirements. L'apport massif de gaz frais diminue progressivement le taux de réaction, jusqu'à mener à l'extinction lorsque la combustion ne



peut plus les consommer assez vite. L'étirement pour lequel l'extinction est atteinte est appelé étirement à l'extinction a_q .

- A l'autre extrémité, la zone C correspond à des étirements suffisamment faibles pour qu'une augmentation de la diffusion avec l'étirement conduise à une augmentation du taux de dégagement de chaleur. La diffusion est donc limitante dans cette zone et les étirements sont suffisamment faibles pour ne pas produire d'extinction. L'auto-inflammation de flammelettes est possible tant que l'étirement reste inférieur à l'étirement à l'auto-inflammation a_i .
- La zone B, comprise entre a_i et a_q , est une zone intermédiaire. Une flammelette provenant de la zone A est nécessairement éteinte (branche inférieure). En entrant dans la zone B, les étirements resteront trop importants pour qu'elle puisse s'auto-enflammer. En revanche, les étirements présents dans cette zone restent trop faibles pour souffler une flamme allumée provenant de la zone C (branche supérieure). Le comportement des flammelettes dans cette zone va donc dépendre de son état initial. Enfin, la branche intermédiaire de la zone B décrit les phénomènes instationnaires. Si une flammelette en cours d'auto-inflammation possède un dégagement de chaleur supérieur à celui indiqué par cette branche, la combustion va continuer à se développer jusqu'à atteindre la branche supérieure. Dans le cas contraire la flammelette sera soufflée.

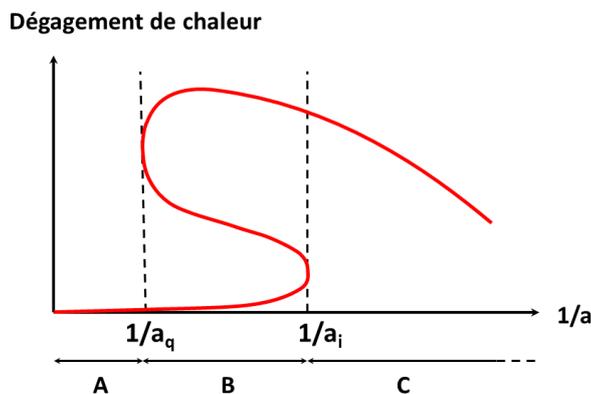


FIGURE 4.1 – Réponse schématique du dégagement de chaleur d'une flammelette à l'étirement.

Dans la suite de ce travail, le terme flammelette s'appliquera uniquement à une flamme de diffusion à contre-courant résolue dans l'espace de la fraction de mélange.

4.2 Flamme de diffusion approchée

Les temps de calcul liés à la résolution de flammelettes restent modérés pour des schémas cinétiques réduits (typiquement moins d'une centaine d'espèces). Néanmoins, les puissances de calcul

nécessaires peuvent devenir rédhibitoires pour les schémas cinétiques détaillés indispensables à la prise en compte des phénomènes complexes intervenants dans la combustion des carburants de type Diesel. De façon à contourner ce problème, Michel et al. (2008) ont développé le modèle ADF (Approximated Diffusion Flame). Ce modèle résout des flammes instationnaires approchées en auto-inflammation. Celles-ci sont très rapides à calculer, même pour des schémas cinétiques détaillés. En effet, contrairement au calcul d'une flammelette nécessitant la résolution du même nombre d'équations de flammelette que d'espèces présentes dans le schéma cinétique, l'approche ADF ne résout cette équation que pour la variable d'avancement Y_c . Le taux de réaction est extrait d'une table de réacteurs homogènes précédemment établie. L'approche ADF permet de reconstruire les espèces si nécessaire, en les extrayant de la base de données, tout comme les taux de réaction.

4.2.1 Présentation du modèle

L'approche ADF consiste à résoudre l'équation des flammes instationnaires Peters (1986) pour la variable d'avancement Y_c^{ADF} :

$$\frac{\partial Y_c^{ADF}}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_c^{ADF}}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_{Y_c}^{ADF} \quad (4.8)$$

Pour chaque flammelette, le taux de réaction peut être défini à partir d'un jeu de grandeurs typiquement utilisées dans les méthodes de tabulation :

- La fraction de mélange Z .
- La température des gaz frais. Les hypothèses précédemment formulées pour l'équation des flammes instationnaires induisent une température des gaz frais (température de gaz non-réactifs soumis aux mêmes conditions de pression, richesse...) linéaire avec la fraction de mélange. Elle est notée $T_u(Z)$. Cette stratification en température est définie par les températures initiales des flux d'air et de carburant.
- Une variable de progrès normalisée c^{ADF} . Celle-ci est définie à partir de la variable d'avancement Y_c^{ADF} transportée dans l'équation des flammes instationnaires : $c^{ADF} = Y_c^{ADF} / Y_c^{eq}$ où l'exposant eq indique l'état d'équilibre à enthalpie et pression constantes.

Le taux de réaction va donc pouvoir être extrait d'une base de données. Dans l'approche ADF, nous utilisons des réacteurs homogènes adiabatiques à pression constante. Pour chaque flammelette à calculer, un jeu de réacteurs homogènes est construit pour différentes fractions de mélange. La température initiale est imposée de façon à reproduire la stratification de la température des gaz frais de la flammelette. L'évolution de la combustion est décrite pour des valeurs discrètes d'une variable d'avancement normalisée c monotone croissante dans le temps. Pour les hydrocarbures, elle est généralement définie comme Fiorina et al. (2003) :

$$c = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}} = \frac{Y_{CO} + Y_{CO_2}}{Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq}} \quad (4.9)$$



Au final, la table de réacteur homogène stocke le taux de réaction de Y_c ainsi que les fractions massiques des espèces.

$$Y_k^{RH} = Y_k(c, Z, T_u(Z)) \quad (4.10)$$

$$\dot{\omega}_{Y_c}^{RH} = \dot{\omega}_{Y_c}(c, Z, T_u(Z)) \quad (4.11)$$

Ainsi, le taux de réaction est extrait de la table de réacteurs homogènes, comme indiqué sur la figure 4.2 présentant un schéma récapitulatif de l'approche ADF.

$$\dot{\omega}_{Y_c}^{ADF} = \dot{\omega}_{Y_c}^{RH}(c^{ADF}, Z, T_u(Z)) \quad (4.12)$$

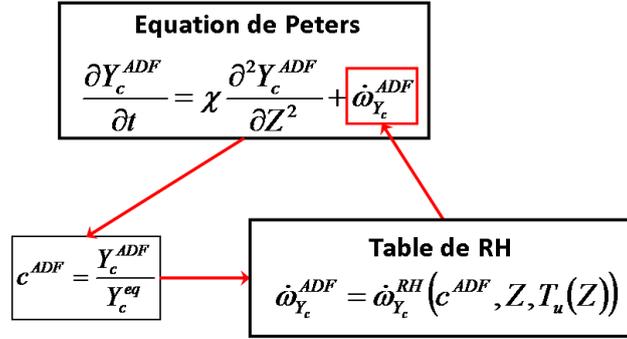


FIGURE 4.2 – Schéma de fonctionnement de l'approche ADF.

L'obtention des fractions massiques des espèces n'est pas nécessaire à la résolution des flammelettes de diffusion approchées. Néanmoins elle peut être extraite de la table de réacteurs homogènes, de la même façon que le taux de réaction.

$$Y_k^{ADF} = Y_k^{RH}(c^{ADF}, Z, T_u(Z)) \quad (4.13)$$

Ainsi, cette approche permet de calculer *a priori* la chimie via des réacteurs homogènes, puis de lui incorporer les termes diffusifs dans un second temps. Les détails spécifiques à la construction de la table ADF ainsi que les discrétisations utilisées sont décrits dans l'annexe A.

4.2.2 Temps de calcul

De façon à évaluer les gains en temps de calcul générés par l'approche ADF, le temps de résolution d'une flamme de diffusion approchée par un code dédié est comparé au temps de résolution d'une flammelette par le logiciel *Cosilab* (2010). Le tableau 4.1 présente les temps de calcul nécessaires à la convergence vers l'état d'équilibre de la flammelette instationnaire pour 4 schémas cinétiques différents. L'approche ADF est comparée à la résolution directe de la flammelette. Les deux

flammes ont été résolues sur 120 points en Z . Pour la flammelette approchée, 120 réacteurs homogènes ont été utilisés. Les différences de temps de calcul sont flagrantes. Pour les schémas réduits où le temps nécessaire au calcul complet d'une flamme de diffusion reste abordable, l'approche ADF permet de réduire le temps de retour de plus d'un ordre de grandeur. Pour les schémas semi-détaillés, le calcul complet d'une flammelette devient problématique puisque celui-ci requiert environ 12 jours de calcul contre seulement 30 minutes pour l'approche ADF. Enfin, seule cette dernière se montre capable de résoudre la flammelette pour des schémas cinétiques détaillés, le logiciel Cosilab ne permettant pas de prendre en compte autant d'espèces.

Schéma cinétique	Temps de calcul	
	Flammelette	ADF
Peters Peters et al. (2002) - 36 espèces - 59 réactions	5 h	50 s pour les RH 10 min pour la flammelette
Liu Liu et al. (2004) - 44 espèces - 112 réactions	10 h	1 min 10 s pour les RH 10 min pour la flammelette
Seiser Seiser et al. (2000) - 159 espèces - 770 réactions	12 jours	20 min pour les RH 10 min pour la flammelette
DCPR Anderlohr et al. (2009) - 536 espèces - 3000 réactions	Nombre d'espèces trop important	3 h 30 min pour les RH 10 min pour la flammelette

TABLE 4.1 – Temps de calcul nécessaires à l'obtention d'une flammelette à l'équilibre en résolvant les équations des flammelettes (avec le code dédié Cosilab) ou avec l'approche ADF pour 4 schémas cinétiques différents.

De façon à pouvoir réaliser une base de données en vue d'un calcul moteur, de nombreux paramètres devront être discrétisés. En considérant 6 points en pression, 4 points en taux de gaz de recirculation, 10 points en étirement et 16 points en stratification en température, c'est 3840 flammelettes qui devront être calculées. Ainsi, l'utilisation de flammelettes montre ici ses limites pour des schémas cinétiques contenant plus d'une centaine d'espèces. La résolution d'une flamme de diffusion approchée est beaucoup plus rapide et peu dépendante du nombre d'espèces. La mise en œuvre de cette approche va permettre l'utilisation de schémas cinétiques complexes tout en limitant les temps de calcul.



4.3 Validation des flammes de diffusion approchées

De façon à évaluer la capacité de l'approche ADF à reproduire une flammelette et étendre les conclusions de [Michel et al. \(2008\)](#) à des conditions de spray Diesel, les résultats de l'approche ADF sont comparés avec ceux d'une flammelette calculée par le logiciel Cosilab. Les flammelettes présentées dans ce chapitre sont résolues pour des configurations représentatives de celles observées lors du calcul du spray Diesel du chapitre 6. Tout comme pour le calcul tridimensionnel, le n-heptane est modélisé par le schéma cinétique de [Seiser et al. \(2000\)](#) comprenant 159 espèces et 770 réactions. La pression ambiante est imposée à 42.25 bar. Le flux d'oxydant est composé uniquement d'air injecté à la température de 900 K. Le flux de carburant est composé de 50 % en masse de carburant et de 50 % d'air. Cette valeur est représentative de la fraction massique de carburant observée autour des gouttes. Elle est limitée par la pression de vapeur saturante qui dépend des conditions thermodynamiques locales. Enfin la température de ce flux de carburant est de 600 K. Ainsi, la température initiale diminue avec l'augmentation de la fraction de mélange.

4.3.1 Prédiction des délais d'auto-inflammation

La capacité de l'approche ADF à reproduire finement le délai d'auto-inflammation est capitale pour la simulation Diesel. Dans les conditions thermodynamiques pour lesquelles les flammelettes sont étudiées, des phénomènes de NTC sont présents. La figure 4.3 présente l'évolution de la température d'un réacteur homogène dans les conditions suivantes : $Z = 0.1$, $T_u = 900\text{K}$ et $p = 42.25$ bars. Dans ces conditions, nous pouvons observer la présence d'une flamme froide caractérisée par un faible dégagement de chaleur puis d'une flamme principale. Ainsi deux délais doivent être définis, l'un pour la flamme froide présente avant la zone de NTC et l'autre pour la flamme principale, postérieure à cette zone. Le délai de flamme froide est défini comme le temps nécessaire à la variable de progrès c pour atteindre la valeur de 0.05. Le délai de flamme principale correspond quant à lui à une valeur de c de 0.5.

Les calculs sont réalisés pour trois étirements différents : 50 s^{-1} , 500 s^{-1} et 5000 s^{-1} . Lors du calcul d'un jet Diesel, des valeurs de 50 s^{-1} sont caractéristiques des zones en tête de spray lorsque celui-ci a suffisamment progressé dans la chambre de combustion. Des étirements de 500 s^{-1} sont typiquement observés dans les zones réactives situées à quelques centimètres de l'injecteur. Enfin le cas à 5000 s^{-1} représente un étirement très important. Celui-ci est peu représentatif des étirements obtenus dans les configurations moteurs puisqu'il n'est observé que de façon ponctuelle à quelques millimètres de l'injecteur dans des zones où seule une faible quantité de carburant a eu le temps de s'évaporer. Ces configurations sont utilisées de façon à tester l'approche ADF dans des conditions pour lesquelles les phénomènes diffusifs sont particulièrement importants.

La comparaison des délais d'auto-inflammation pour les trois étirements est présentée sur la

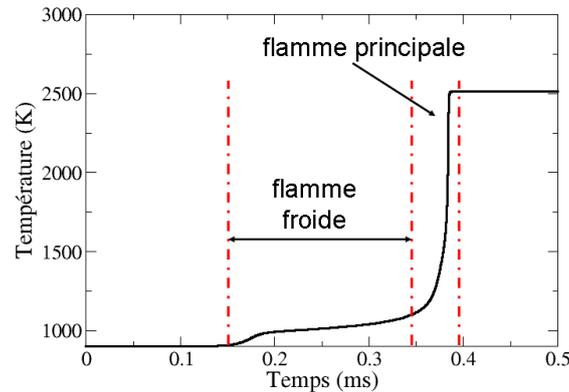


FIGURE 4.3 – Évolution de la température pour un réacteur homogène dans les conditions suivantes : $Z = 0.1$, $T_u = 900\text{K}$ et $p = 42.25$ bars.

figure 4.4. Nous nous intéressons dans un premier temps au comportement de la flammelette avec l'étirement pour les calculs Cosilab. Pour le cas à 50 s^{-1} (Fig. 4.4(a)), la flamme froide s'initie pour une faible fraction de mélange ($Z = 0.045$), le délai étant minimum. Pour ce faible étirement, le délai d'auto-inflammation est fortement dépendant de la fraction de mélange. Avec l'augmentation de l'étirement (Fig. 4.4(b), 4.4(c)) l'influence de la fraction de mélange sur le délai d'auto-inflammation est réduite. En effet, l'augmentation de l'étirement accroît la diffusion de la température et des espèces radicalaires. Ainsi lorsque l'auto-inflammation se produit pour une fraction de mélange, les espèces produites et la chaleur dégagée vont rapidement se propager vers les fractions de mélange moins réactives n'ayant pas encore réagi, réduisant ainsi les différences de délais. Le délai de flamme principale suit le même comportement que le délai de flamme froide : pour les faibles étirements, il est fortement dépendant de la fraction de mélange et cette dépendance décroît avec l'augmentation de l'étirement. Néanmoins, nous pouvons observer que la fraction de mélange la plus réactive Z_{mr} , définie comme la fraction de mélange possédant le délai le plus court, varie avec l'étirement et l'avancement choisi. Ainsi pour le cas à 50 s^{-1} la fraction de mélange la plus réactive se situe à $Z = 0.045$ pour la flamme froide et $Z = 0.11$ pour la flamme principale. Avec l'augmentation de l'étirement, la fraction de mélange la plus réactive se déplace, particulièrement pour la flamme principale. Elle passe de $Z = 0.11$ pour $a = 50\text{ s}^{-1}$ à $Z = 0.16$ pour le cas à 500 s^{-1} et enfin $Z = 0.25$ pour le cas à 5000 s^{-1} . Pour ce dernier étirement, la définition d'une valeur unique du Z_{mr} reste néanmoins subjective puisque très peu de différences de délai sont observées avec la fraction de mélange.

Nous observons ici que la définition de la fraction de mélange la plus réactive Z_{mr} , introduite par Mastorakos et al. (1997), fonction uniquement des températures air et carburant n'est pas utilisable. Dans la suite de ces travaux, nous définirons Z_{mr} comme la fraction de mélange présentant le délai le plus faible pour atteindre un avancement $c = 0.05$. Dans ces conditions, Z_{mr} n'est que peu fonction de l'étirement.

Nous nous intéressons maintenant aux comparaisons des délais d'auto-inflammation entre les



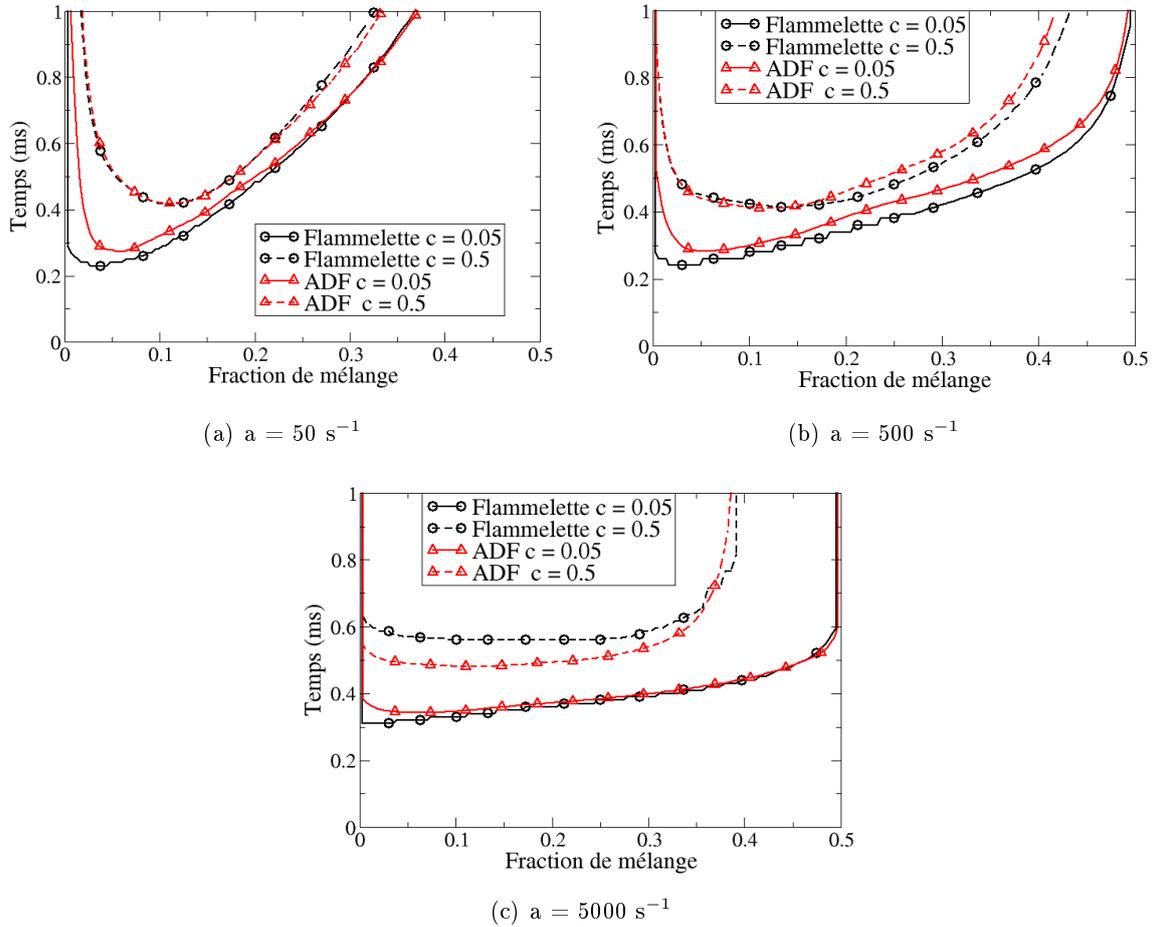


FIGURE 4.4 – Comparaison des délais de flamme froide ($c = 0.05$) et de flamme principale ($c = 0.5$) entre une flammelette (en noir) et une flammelette approchée (en rouge) à 42.25 bars et pour une stratification en température définie par : $T_a = 900\text{K}$ et $T_u = 600\text{K}$. Les délais sont comparés pour les trois étirements suivants : 50 s^{-1} (a), 500 s^{-1} (b) et 5000 s^{-1} (c).

résultats fournis obtenus par la flammelette et la flammelette approchée. Pour les cas soumis à des étirements de 50 et 500 s^{-1} , l'approche ADF reproduit de façon particulièrement précise les délais d'auto-inflammation prédits par la flammelette, que ce soit pour la flamme froide ou la flamme principale. On note néanmoins, pour le cas à 500 s^{-1} , une légère surestimation du délai obtenu par l'approche ADF pour les fortes fractions de mélange. C'est le cas soumis au plus fort étirement (5000 s^{-1}) qui présente le plus de différences la flammelette. On y observe un délai de flamme principale sous-estimé d'environ $100 \mu\text{s}$ à la stœchiométrie par ADF et ce malgré un délai de flamme froide parfaitement prédit. L'approche ADF montre donc ici sa capacité à reproduire les délais d'auto-inflammation pour la gamme d'étirements rencontrés dans les moteurs Diesel. Seul le cas possédant l'étirement le plus fort présente des différences significatives avec le calcul de la flammelette.

4.3.2 Structure de la flamme de diffusion en auto-inflammation

Dans cette section nous observons l'évolution du profil de Y_c lors du processus d'auto-inflammation pour une flammelette et une flamme de diffusion approchée. Ces comparaisons sont réalisées pour des étirements de 50 s^{-1} (Fig. 4.5), 500 s^{-1} (Fig. 4.6) et 5000 s^{-1} (Fig. 4.7). L'auto-inflammation du n-heptane peut être séparée en trois phases. Tout d'abord une phase de flamme froide durant laquelle les premières réactions initialement présentes dans des zones pauvres ayant les plus hautes températures se déplacent vers des zones plus froides et plus riches. Cette phase est représentée par la première courbe en temps, typiquement vers $350 \mu\text{s}$. Vient ensuite la phase d'auto-inflammation principale qui se caractérise par une combustion très rapide. La troisième et dernière phase est une phase de propagation de la combustion dans l'espace de la fraction de mélange vers des zones moins réactives. La vitesse de propagation dans cet espace va être fortement liée à l'étirement.

Pour les faibles étirements (50 s^{-1} figure 4.5) ADF reproduit parfaitement la dynamique de l'auto-inflammation de la flammelette et la propagation de la combustion vers les zones plus riches. L'auto-inflammation principale se produit à environ $410 \mu\text{s}$ pour une fraction de mélange légèrement supérieure à 0.1, en accord avec les résultats obtenus pour la flammelette. La combustion se propage ensuite lentement vers les zones n'ayant pas encore réagi, comme indiqué par les profils de Y_c à $510 \mu\text{s}$ et $2000 \mu\text{s}$. En ce qui concerne les étirements plus élevés (500 s^{-1} figure 4.6) l'accord entre ADF et la flammelette reste tout à fait satisfaisant. Les profils à $350 \mu\text{s}$ et $410 \mu\text{s}$ montrent tous deux une bonne reproduction des phases de flamme froide et de flamme principale. On note néanmoins qu'avec l'augmentation de l'étirement, la fraction de mélange pour laquelle la flamme principale se produit s'est décalée. Pour les calculs de la flammelette, elle est passée de 0,11 à 0,16. Cet effet n'est que partiellement reproduit par l'approche ADF, la flamme principale se développant à une fraction de mélange de 0,13. Pour ces raisons, à $t = 0.510 \mu\text{s}$, la combustion de la flammelette s'est propagée jusqu'à des fractions de mélange plus importantes que pour le cas ADF. C'est pour les étirements les plus forts (5000 s^{-1} , figure 4.7) que les différences entre les résultats prédits par ADF et la flammelette sont les plus notables. La flammelette prédit une flamme froide très longue, car fortement décalée en richesse, avec une fraction massique pour la flamme principale d'environ 0.25 (à $t = 540 \mu\text{s}$). Dans le cas ADF, le délai de flamme principale est plus court et se produit à $480 \mu\text{s}$. L'auto-inflammation y est plus brutale que pour la flammelette car elle se produit pour une fraction de mélange $Z = 0.18$, plus proche de la stœchiométrie que dans le calcul de la flammelette. On retrouve ici les différences concernant les délais d'auto-inflammation de flamme principale précédemment observés.



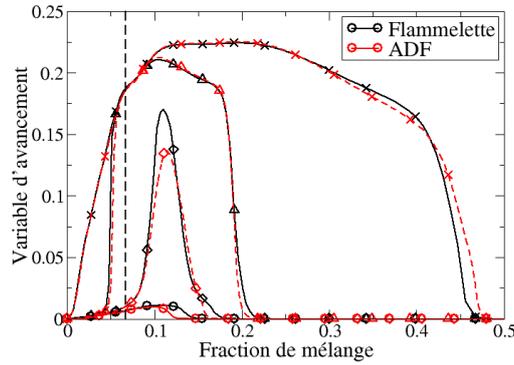


FIGURE 4.5 – Comparaison des profils de Y_c en fonction de Z obtenus pour une flammelette et ADF pour un étirement de 50 s^{-1} aux temps $t = 350 \mu\text{s}$, $t = 410 \mu\text{s}$, $t = 510 \mu\text{s}$ et $t = 2000 \mu\text{s}$. La ligne pointillée représente la fraction de mélange à la stœchiométrie.

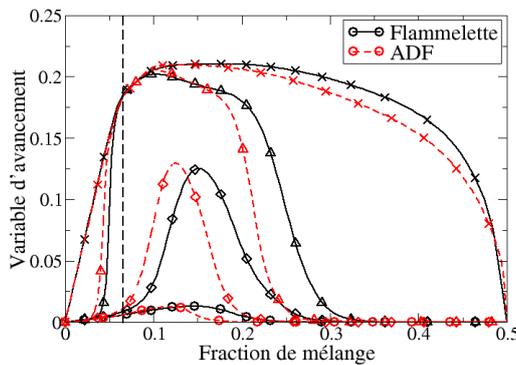


FIGURE 4.6 – Comparaison des profils de Y_c en fonction de Z obtenus pour une flammelette et ADF pour un étirement de 500 s^{-1} aux temps $t = 350 \mu\text{s}$, $t = 410 \mu\text{s}$, $t = 510 \mu\text{s}$ et $t = 2000 \mu\text{s}$. La ligne pointillée représente la fraction de mélange à la stœchiométrie.

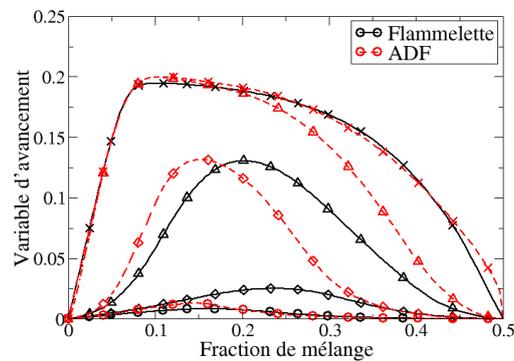


FIGURE 4.7 – Comparaison des profils de Y_c en fonction de Z obtenus pour une flammelette et ADF pour un étirement de 5000 s^{-1} aux temps $t = 400 \mu\text{s}$, $t = 480 \mu\text{s}$, $t = 540 \mu\text{s}$ et $t = 2000 \mu\text{s}$. La ligne pointillée représente la fraction de mélange à la stœchiométrie.

4.3.3 Diffusion des espèces

Les résultats présentés jusqu'ici semblent montrer que l'approche ADF reproduit parfaitement la structure de flamme pour des étirements typiques des conditions moteur. Néanmoins les capacités de prédiction ne semblent pas aussi fines pour les cas à fort étirement pour lesquels les phénomènes diffusifs sont importants. Nous nous penchons donc ici sur les hypothèses avancées par l'approche ADF pour le calcul de la diffusion des espèces.

Le code de flammelettes approchées ne résout l'équation des flammelettes que pour la variable de progrès Y_c . Les espèces sont extraites d'une table de réacteurs homogènes. Ainsi, la diffusion des espèces n'est jamais explicitement calculée dans cette approche. Il est néanmoins possible de calculer la diffusion équivalente pour la comparer au terme de diffusion d'une flammelette, considéré ici comme la référence.

La fraction massique d'une espèce étant uniquement fonction de Z et de Y_c (Eq. 4.10), sa dérivée temporelle s'écrit :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Z} \frac{\partial Z}{\partial t} + \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Y_c} \frac{\partial Y_c}{\partial t} \quad (4.14)$$

Pour une flamme de diffusion résolue dans l'espace de la fraction de mélange, Z et t sont indépendants et le terme $\partial Z/\partial t$ est donc nul. En remplaçant $\partial Y_c/\partial t$ par son expression (Eq. 4.8) nous obtenons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial Y_k}{\partial t} &= \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Y_c} \left[\chi \frac{\partial^2 Y_c}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_{Y_c}^{RH} \right] \\ &= \chi \frac{\partial^2 Y_c}{\partial Z^2} \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Y_c} + \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Y_c} \dot{\omega}_{Y_c}^{RH} \end{aligned} \quad (4.15)$$

où $\dot{\omega}_{Y_c}^{RH}$ correspond au taux de réaction de Y_c extrait de la table de réacteurs homogènes. Par ailleurs, dans un réacteur homogène on peut écrire :

$$\begin{aligned} \dot{\omega}_{Y_k}^{RH} &= \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial t} \\ &= \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Y_c} \frac{\partial Y_c}{\partial t} \\ &= \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Y_c} \dot{\omega}_{Y_c}^{RH} \end{aligned} \quad (4.16)$$

du fait de la bijectivité entre Y_c et t . Ainsi nous obtenons l'expression finale :

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_c}{\partial Z^2} \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Y_c} + \dot{\omega}_{Y_k}^{RH} \quad (4.17)$$

Dans l'hypothèse où cette équation représente une équation de flammelette, le terme $\chi \partial^2 Y_c / \partial Z^2 \times \partial Y_k^{RH} / \partial Y_c$ joue le rôle d'un terme diffusif. De façon à vérifier la validité de cette approximation,



une comparaison entre les termes diffusifs exacts (Eq. 4.18) et approchés (Eq. 4.19) pour une espèce k est conduite :

$$\Xi_{exact} = \chi \frac{\partial^2 Y_k}{\partial Z^2} \quad (4.18)$$

$$\Xi_{ADF} = \chi \frac{\partial^2 Y_c}{\partial Z^2} \frac{\partial Y_k^{RH}}{\partial Y_c} \quad (4.19)$$

Dans ce but, une flammelette soumise à un étirement de 500 s^{-1} a été calculée grâce au logiciel Cosilab dans les conditions décrites dans la sous-section 4.3.2. Le calcul Cosilab permet d'extraire les profils d'espèces pour différents instants. La variable de progrès Y_c est reconstruite à partir des fractions massiques de CO et CO_2 (Eq. 4.9). Les termes diffusifs exacts Ξ_{exact} et approchés Ξ_{ADF} sont ensuite recalculés selon les équations (4.18) et (4.19).

Nous présentons dans un premier temps les profils des fractions massiques de Y_c et CO aux instants $t = 350 \mu\text{s}$, $t = 410 \mu\text{s}$ et $t = 600 \mu\text{s}$ sur la figure 4.8. A $350 \mu\text{s}$, la combustion se trouve dans la phase de flamme froide. Les seconds profils présentés correspondent au temps $t = 410 \mu\text{s}$. Les pics de Y_c et de la fraction massique de CO , localisés à $Z = 0.16$, indiquent des réactions rapides, caractéristiques de la phase de combustion principale. Enfin, de dernier profil au temps $t = 600 \mu\text{s}$ correspond à la phase de propagation de la combustion dans l'espace de la fraction de mélange. Les profils de Y_c et de CO sont relativement lisses pour des fractions de mélange comprises entre la stœchiométrie ($Z_{st} = 0.062$) et 0.3, zones à travers lesquelles la combustion s'est propagée. De plus, les valeurs de Y_c y sont relativement importantes, indiquant que la combustion a atteint l'équilibre ou en est proche.

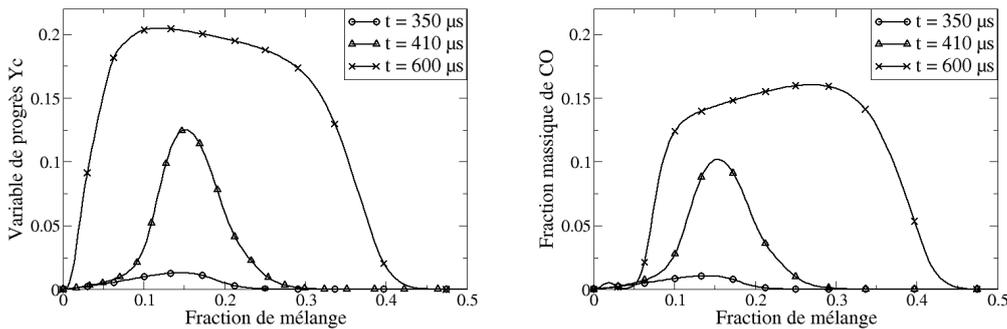


FIGURE 4.8 – Profils de Y_c (à gauche) et de la fraction massique de CO (à droite) en fonction de Z aux temps $t = 350 \mu\text{s}$, $t = 410 \mu\text{s}$ et $t = 600 \mu\text{s}$.

La diffusion de l'espèce CO est étudiée à ces mêmes instants de façon à l'observer dans les différentes étapes de la combustion, de son initiation à sa propagation vers les zones moins réactives. Ainsi, la figure 4.9 compare les termes de diffusion de l'espèce CO aux temps $t = 350 \mu\text{s}$, $t = 410 \mu\text{s}$ et $t = 600 \mu\text{s}$.

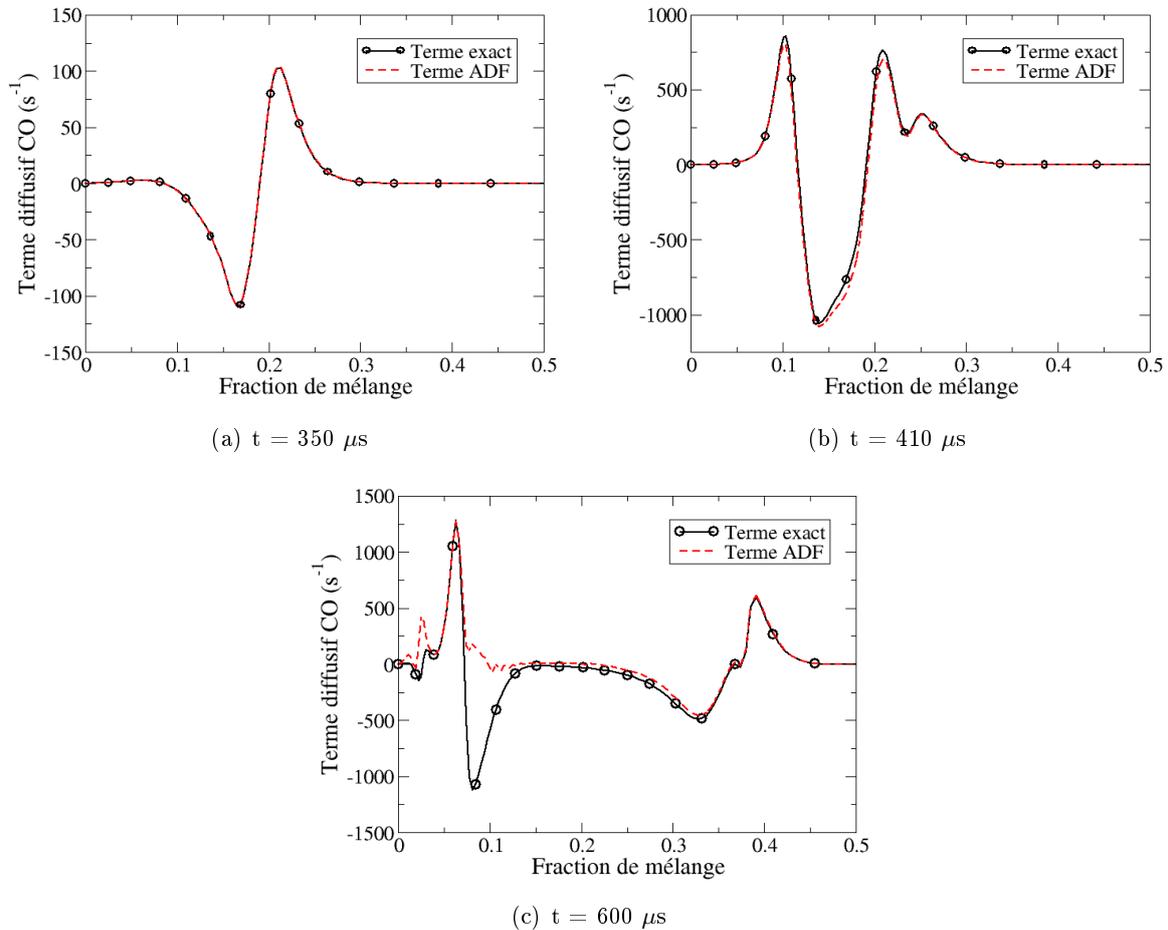


FIGURE 4.9 – Comparaison des termes de diffusion Ξ de la flammelette et des termes de diffusion approchés (ADF) de l'espèce CO aux temps $t = 350 \mu s$ (a), $410 \mu s$ (b) et $600 \mu s$ (c).

Le terme Ξ représente la diffusion de l'espèce considérée dans l'espace de la fraction de mélange. Les valeurs négatives de ce terme indiquent une diffusion de cette espèce au profit des zones pour lesquelles Ξ est positif.

A l'instant $t = 350 \mu s$ sur la figure 4.9(a), le terme diffusif exact présente un pic négatif pour une fraction de mélange $Z = 0.16$ et un pic positif vers $Z = 0.21$. Cela signifie que le CO diffuse dans l'espace de la fraction de mélange de $Z = 0.16$ jusqu'à $Z = 0.21$. Ces valeurs concordent avec le profil de CO au même instant présenté par la figure 4.8. Celui-ci présente un pic à $Z = 0.16$ alors que la zone de plus forte inflexion convexe est localisée pour des valeurs proches de $Z = 0.21$. A $410 \mu s$ dans la phase de combustion principale, le profil d'espèce présenté par la figure 4.8 montre un pic plus marqué, centré sur $Z = 0.14$. Celui-ci étant plus important, le flux diffusif augmente fortement comme nous pouvons l'observer sur la figure 4.9(b). De plus, le CO produit par les réactions chimiques ne diffuse plus uniquement vers les zones les plus riches mais aussi vers les zones les plus pauvres, comme l'indiquent les deux pics positifs respectivement situés pour des fractions de mélange de 0.1 et 0.22. Enfin, à $600 \mu s$ (Fig. 4.9(c)), le terme diffusif de



l'espèce CO pour la flammelette présente une forte diffusion avec l'alternance d'un pic positif et d'un d'un pic négatif pour des richesses légèrement supérieures à 1 ($Z \approx 0.07$). C'est en effet dans cette zone que se situe le point d'inflexion entre les zones riches et fortement chargées en CO et les zones pauvres pour lesquelles le CO n'est pas présent car oxydé en CO_2 . Un second pic de diffusion est présent pour des fractions de mélange importantes. Celui-ci est engendré par les fortes différences de concentrations de CO entre la zone limite de propagation de la combustion, fortement chargée en CO , et les zones n'ayant pas encore réagi.

La figure 4.9 montre que l'approche ADF reproduit parfaitement la diffusion de l'espèce CO à $350 \mu s$ et à $410 \mu s$. Néanmoins, à $600 \mu s$, la diffusion du CO n'est pas correctement reproduite pour de faibles fractions de mélange (inférieures à $Z = 0.15$) liées à une variable de progrès proche de l'équilibre. On peut observer que le pic de diffusion négatif à $Z = 0.08$, n'est pas reproduit. L'approche ADF semble donc bien reproduire la diffusion des espèces pour de faibles avancements, puis introduit un biais lorsque ceux-ci augmentent. De façon à expliquer les différences entre les termes de diffusion exacts et reconstruits, la figure 4.10 présente l'évolution de la fraction massique de CO en fonction de la variable de progrès Y_c pour 3 fractions de mélange différentes. Pour de très faibles valeurs de la variable de progrès, les fractions massiques de CO évoluent linéairement avec Y_c . Le terme $\partial Y_k^{RH} / \partial Y_c$ est donc égal à 1 et le terme $\partial^2 Y_c / \partial Z^2$ égal à $\partial^2 Y_k / \partial Z^2$. Dans ces conditions, les équations (4.18) et (4.19) sont identiques. Le CO évolue de façon similaire à Y_c pour une part importante de la variable de progrès. Sa diffusion est donc parfaitement reproduite par l'approche ADF. Pour les plus fortes variables de progrès, l'évolution du CO diffère de celle de Y_c et la diffusion n'est plus correctement reproduite.

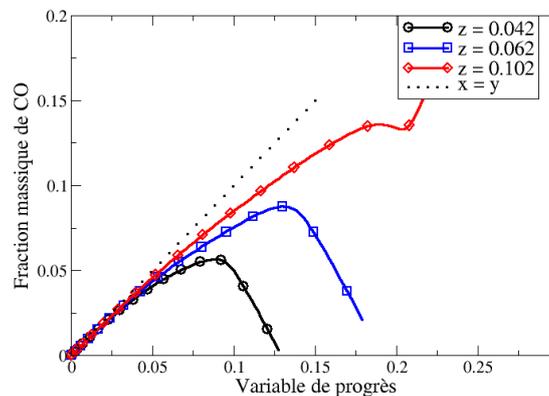


FIGURE 4.10 – Évolution de la fraction massique de CO en fonction de la variable de progrès Y_c pour 3 valeurs de la fraction de mélange : $Z = 0,042$, $Z = 0,062$ et $Z = 0,102$.

La diffusion du CO est donc bien reproduite pour la majorité des valeurs de la variable d'avancement. Néanmoins, la reproduction de la diffusion des espèces intermédiaires, fortement non linéaires avec la variable d'avancement, est plus problématique. La figure 4.11 compare les termes de diffusion de l'espèce OH aux temps $t = 350 \mu s$, $t = 410 \mu s$ et $t = 600 \mu s$.

Nous pouvons voir ici que le terme de diffusion reconstruit par l'approche ADF est tout à fait

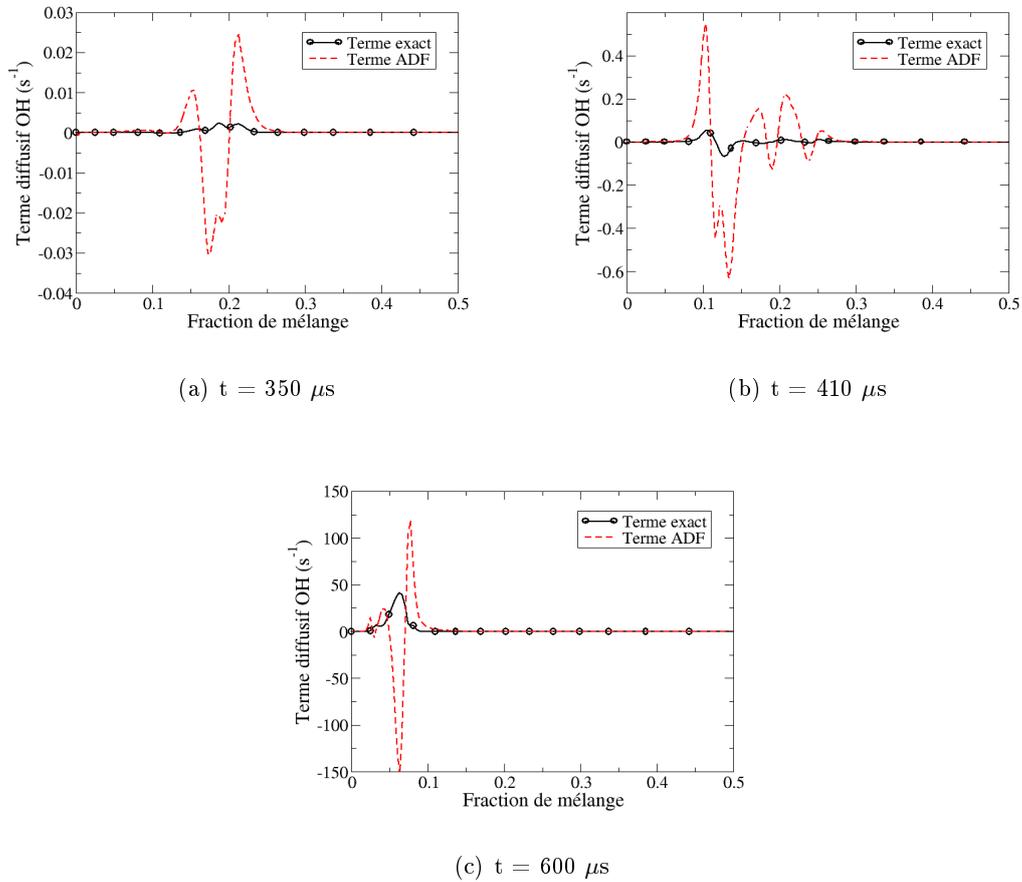


FIGURE 4.11 – Comparaison des termes de diffusion de la flammelette et des termes de diffusion approchés (ADF) de l'espèce OH aux temps $t = 350 \mu s$ (a), $410 \mu s$ (b) et $600 \mu s$ (c).

différent de celui prédit par la flammelette. ADF surestime de plus d'un ordre de grandeur les valeurs du terme diffusif exact et ne semble avoir aucune corrélation avec celui-ci.

Nous comprenons ici mieux les différences observées entre une flammelette et une flammelette approchée. Puisque l'approche ADF ne transporte que Y_c , elle suppose que toutes les espèces ont une diffusion basée sur celle de la variable de progrès. Cette hypothèse, valable pour les espèces ayant une évolution similaire à celle de la variable de progrès comme le CO , est ici mise en défaut pour les espèces intermédiaires comme le OH . Pour les cas à faible étirement ($\approx 50 s^{-1}$) l'importance du taux de réaction va être prépondérante sur les effets diffusifs. Ceux-ci intervenant peu, l'approche ADF reproduit parfaitement la structure de la flamme de diffusion. Pour des étirements plus élevés ($\approx 500 s^{-1}$), les phénomènes diffusifs gagnent en importance. La reproduction de la diffusion des espèces majoritaires est néanmoins tout à fait suffisante, ce qui permet à l'approche ADF de prédire de façon satisfaisante la structure de la flamme de diffusion. C'est seulement pour les étirements les plus importants ($\approx 5000 s^{-1}$), peu représentatifs de cas Diesel, que des différences plus significatives peuvent être observées. Le modèle ADF prédit



une auto-inflammation plus rapide de la flammelette approchée d'environ $100 \mu\text{s}$. Il reproduit néanmoins l'état d'équilibre de la flammelette.

4.4 Conclusion

Ce chapitre a traité de la résolution de flammes de diffusion laminaires à contre-courant. Il a été mis en évidence que l'utilisation d'approches basées sur la tabulation de flammelettes n'est viable que pour des schémas comprenant moins d'une centaine d'espèces. Pour des schémas cinétiques plus importants, les temps de calcul nécessaires deviennent prohibitifs. De façon à pouvoir utiliser des schémas cinétiques détaillés, l'approche ADF, développée par Michel et al. (2008), a été présentée. Elle permet la résolution de flammes de diffusion approchées, beaucoup plus rapides à calculer que des flammelettes. Néanmoins celles-ci introduisent des hypothèses quant à la diffusion des espèces. La majeure partie de ce chapitre a donc consisté à vérifier les capacités prédictives de cette approche et son domaine de validité. Pour cela nous avons comparé les résultats obtenus pour une flammelette à ceux obtenus pour une flammelette approchée. Ces comparaisons ont été réalisées sur une configuration représentative de conditions moteurs. Nous avons pu observer la capacité de l'approche ADF à reproduire finement le délai d'auto-inflammation ainsi que la structure de flamme pour une gamme d'étirement typique des moteurs Diesel. Néanmoins, pour les étirements les plus importants où la diffusion joue un rôle prépondérant, des écarts significatifs apparaissent entre les résultats obtenus par ADF la flammelette. De façon à mieux comprendre ces différences, nous avons conduit une étude des hypothèses faites sur la diffusion des espèces par l'approche ADF. Il a été montré que pour les espèces ayant une évolution linéaire avec la variable d'avancement, la diffusion était parfaitement reproduite. Ce n'est pas le cas de toutes les espèces, et particulièrement des espèces intermédiaires comme le *OH*. Néanmoins, pour la gamme d'étirements observés dans les configurations moteurs, les hypothèses de l'approche ADF n'ont, au regard de la configuration testée, pas de conséquences significatives sur la combustion. La prédiction des espèces en fin de combustion n'est pas non plus altérée, l'étirement diminuant de façon très rapide dans le temps.

Chapitre 5

Simulation aux grandes échelles d'un spray Diesel en enceinte fermée

Ce chapitre reprend l'article “*Assessing LES models based on tabulated chemistry for the simulation of Diesel spray combustion*” soumis au journal *Combustion and Flame* en septembre 2012. Il présente deux modèles de combustion basés sur la tabulation de la chimie, chacun couplé à deux approches prenant en compte ou non les fluctuations de sous-maille de la fraction de mélange. Ces approches sont comparées sur l'expérience d'un jet liquide auto-inflammant réalisée par [Bruneaux \(2008\)](#) à IFP Energies Nouvelles. De façon à ne pas réintroduire les nombres adimensionnels nécessaires au calcul des échanges entre les phases liquides et gazeuses présentés dans le Chapitre 3, l'annexe de cet article a été supprimée. Des résultats complémentaires concernant la dynamique du spray dans un cas non-réactif sont ensuite présentés dans la Section 5.2).

5.1 Assessing LES models based on tabulated chemistry for the simulation of Diesel spray combustion

Abstract

In the context of Large-Eddy Simulation (LES) of Diesel engine combustion, two LES combustion models are proposed. Their ability to predict auto-ignition delays and heat release of an auto-igniting liquid α -methylnaphtalene/n-decane jet injected into a constant volume chamber under Diesel-like conditions is assessed. These models retain the tabulation of a complex chemistry scheme using auto-igniting homogeneous reactors (HR) at constant pressure. This allows accounting for the chemical complexity of heavy hydrocarbon fuels over the wide range of conditions representative of Diesel Engines, at comparatively low CPU time overhead. The tabulated homogeneous reactor (THR) approach assumes the local structure of the reaction



zone to be that of an HR, while the approximated diffusion flame (ADF) approach is based on auto-igniting strained diffusion flames. Two variants of each approach are considered, either neglecting subgrid-scale mixture fraction variance (THR and ADF models), or accounting for it via a presumed β -PDF (THR-PDF and ADF-PCM models). LES results indicate that the ADF model assuming diffusion flame structures tends to predict a faster propagation of the combustion toward less reactive mixture fractions compared to the THR model. Moreover neglecting the mixture fraction fluctuations strongly over-estimates initial experimental heat release rates after auto-ignition. Comparison between models shows that this assumption yields higher reaction rates and temperature levels close to the stoichiometric mixture fraction zones. Predictions in terms of auto-ignition are remarkably close with all models, and exhibit very few variations from one realisation to the other. Variations in global heat release rate become more apparent for different realisations at later instants, in relation to the interaction between large flow scales with combustion.

5.1.1 Introduction

The simulation of Diesel spray combustion by computational fluid dynamics (CFD) is a very challenging task. It requires modelling and simulating the transient liquid fuel injection at very high pressures. The resulting spray formation and evolution leads to a highly turbulent stratified flow in which the fuel evaporates, mixes with the gases present in the cylinder, and finally auto-ignites and burns. Furthermore, the high order hydrocarbon fuels most commonly used in Diesel engines exhibit a negative temperature coefficient (NTC) region resulting from a competition between low and high temperature chemistry (Yang et al., 2010). The use of detailed chemistry to predict these effects is therefore mandatory, and the kinetic schemes must be able to predict combustion chemistry over the wide range of mixture fraction, temperature, pressure and dilution rates typical of Diesel engines.

A wealth of research has been dedicated to simulating Diesel-type sprays, resulting in a broad range of combustion models able to reproduce with acceptable accuracy auto-ignition delays, lift-off lengths, heat release and pollutant emissions. Most of these models were formulated in the frame of a Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) approach (De Paola et al., 2008). More recently Large-Eddy Simulation (LES) has received increasing interest (Li and Kong, 2008; Seo et al., 2010) as it is believed to allow a more accurate prediction of the unsteady and highly stratified flow conditions found in Diesel sprays. This is a direct consequence of the fact that LES simulates local, instantaneous, spatially filtered flows, resolving the largest flow scales and modelling only the effects of the smallest ones. In addition to an improved predictivity, it potentially allows addressing non-cyclic phenomena not accessible to RANS.

A widely used approach to account for complex fuel chemistry in Diesel combustion simulations,

either in RANS or LES formalisms, is to directly solve for it within a CFD code. [Jhavar and Rutland \(2006\)](#) applied such an approach to the LES of a HCCI engine, [Li and Kong \(2008\)](#) to the LES of a conventional Diesel engine. A major drawback of this method is the important CPU time required to solve the chemistry on-line and for transporting all the required chemical species. Therefore such approaches use reduced chemical schemes with a domain of validity which is often much smaller than the one of detailed schemes, and rely on coarse CFD meshes to limit CPU time requirements. Furthermore no closure is considered to describe the interactions between turbulence and chemistry. The conditional moment closure (CMC) ([Klimenko and Bilger, 1999](#)) approach addressing this point by solving balance equations for moments conditioned on the mixture fraction has successfully been applied to RANS ([Wright et al., 2009](#)) and LES ([Seo et al., 2010](#)) computations of Diesel combustion. In terms of practical usage however, CMC formalism requires important computational overhead, especially for detailed chemical schemes.

An alternative approach is to retain the flamelet assumption ([Peters, 1984, 1986](#)) to model turbulent non-premixed flames. The representative interactive flamelet (RIF) model ([Peters, 2000; Pitsch et al., 1995](#)) uses this assumption and computes one ([Pitsch et al., 1995](#)) or several ([Barths et al., 1999](#)) laminar diffusion flames using a dedicated flamelet code coupled on-line to the CFD code. This approach has widely been used for RANS computations of Diesel combustion ([Barths et al., 1999; Felsch et al., 2009](#)), but remains very time consuming when applied to detailed chemical schemes.

A solution to bypass this limitation is to use a flamelet/progress variable (FPV) approach ([Pierce and Moin, 2004](#)). Its principle is to generate *a priori* a flamelet look-up table with a reduced number of input parameters. During the computation the look-up table is used in the CFD code to estimate the species reaction rates. The advantage of this tabulation approach is that the resolution of the chemistry is done prior to the CFD computation so that the computational overhead is very small : this approach only requires the transportation of few chemical species in the CFD code, and the resolution of complex schemes is replaced by interpolations in a look-up table with few parameters. A β -PDF is assumed for the mixture fraction distribution. [Pierce and Moin \(2004\)](#) performed LES computations of a coaxial jet combustor and obtained satisfactory results using steady state flamelets. In order to avoid the explicit dependence on a flamelet time scale, [Ihme et al. \(2005\)](#) proposed the unsteady flamelet/progress variable (UFPV) model based on unsteady flamelets. They reported a significant improvement of auto-ignition delays in their LES as compared to a steady flamelet approach. Using a similar approach based on tabulated unsteady flamelets with a progress variable based on the enthalpy, [Lehtiniemi et al. \(2006\)](#) performed RANS calculations of a Diesel type spray. Depending on the configuration, many flamelets may have to be resolved for different initial conditions to produce a complete look-up table. This generation can become excessively CPU time consuming and even outrun memory capacities if applied with detailed chemical schemes. For this reason the ADF-PCM model ([Michel et al., 2009b,a](#)) tabulates approximated diffusion flames. It consists in resolving the flamelet equation only for the progress variable and extract reaction rates and species from a



pre-tabulated homogeneous reactor look-up table. This allows both reducing the computational time required to build the look-up tables and using detailed chemical schemes.

The characteristic scales of turbulent mixing and chemistry may largely vary within a cycle, or from one engine type to another depending on the used injection strategy. Lee et al. (2000, 2002) applied a combination of models for addressing three main types of Diesel combustion : the Shell model (Halstead et al., 1977) for auto-ignition, a characteristic time combustion model for the premixed phase (Kong et al., 1995), and a tabulated steady flamelet model for non-premixed combustion. The transition between premixed and non-premixed combustion is performed based on the local Damköhler number. Hu et al. (2008) performed simulations of conventional and HCCI Diesel modes with the extended flamelet time scale (EFTS) model (Rao and Rutland, 2003) coupled with a reduced chemistry scheme for the auto-ignition modelling. The EFTS approach consists in relaxing flamelet species toward equilibrium with a pre-tabulated relaxation time that is a function of mixture fraction. Hu et al. (2010b) also reported a similar approach based on the distinction between kinetically controlled, quasi-steady homogeneous and quasi steady flamelet combustion for conventional engines. A difficulty of such approaches is the definition of the transitions between different models based on criteria that lack generality, which can be expected to lead to a lack of predictive accuracy (da Cruz et al., 2001).

The application of LES to Diesel spray combustion is yet very limited, and most of the published work relies on using RANS CFD codes and coarse grids, simply replacing RANS turbulence models by subgrid-scale LES models (Seo et al., 2010; Jhavar and Rutland, 2006; Hu et al., 2010b). Although predictions were found accurate, this ad-hoc approach does not allow fully exploiting the improved predictive capability of LES, as it relaxes its specific requirements in terms of numerical accuracy and spatial resolution.

The purpose of the present study is to assess the ability of two non-premixed combustion models based on off-line chemistry tabulation to predict Diesel spray combustion using a CFD code. Liquid spray and subgrid-scale models, as well as a numerical set-up are specifically tailored to fulfil LES requirements. The assessed combustion models offer the advantage to account for complex chemistry effects, while leading to small CPU time overheads when used in the LES code. Both these characteristics are of crucial importance for future practical applications to full Diesel engine LES.

The common principle of the combustion models proposed in the present paper is to build a chemistry look-up table based on auto-igniting homogeneous reactors (HR) at constant pressure simulated using a detailed chemistry scheme. This look-up table is then exploited in two different ways, assuming the subgrid-scale structure of the reaction zone to be either that of a homogeneous reactor, or that of a strained diffusion flame. Both these models are proposed in two variants, depending on the form of the presumed mixture fraction PDF used to render subgrid-scale mixture fraction stratification effects. They are then implemented into the LES flow solver AVBP and applied to the simulation of a Diesel-type jet experiment.

Section 5.1.2 starts by setting the LES modelling framework, describing the set of transport equations used for the gaseous phase, shortly outlining the spray description based on a mesoscopic Eulerian formalism, and presenting the LES closures used for the unknown convection, evaporation and mixing terms. Section 5.1.3 proposes a detailed description of the two proposed combustion models. After outlining their common principles, details are given on their formulation, adaptation to the LES context and integration into the CFD code. Section 5.1.4 presents a first application of the developed approach to the LES of a liquid spray composed of 30% α -methylnaphthalene and 70% n-decane injected into a constant volume chamber under conditions representative of a pilot Diesel injection. First, the experimental set-up studied by Bruneaux (2008) is described, before detailing the numerical configuration using the AVBP LES code (Moureau et al., 2005), and the imposed boundary conditions for the Eulerian liquid jet model. An analysis of the quality of the LES results is also presented and discussed. Finally, Section 5.1.5 discusses the LES results, assessing the predictive capability of the discussed combustion models and variants.

5.1.2 Basic equations

A perfect gas mixture composed of N species is considered. The turbulent flow is described by the compressible reactive multi-species Navier-Stokes equations. This set of equations is complemented by equations for the liquid phase incorporating droplets' drag and liquid evaporation. In order to yield the LES model equations, this set of basic equations is spatially filtered to separate the largest, resolved, from the smallest, unresolved, flow scales. In the following equations, the superscript $-$ denotes the filtered variable and superscript \sim the mass-weighted Favre filter (Poinsot and Veynante, 2011) defined for a quantity f as :

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} \quad (5.1)$$

with $\bar{\rho}$ the filtered density.

5.1.2.1 Gas phase equations

The filtered LES equations for the gas phase momentum read :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = & - \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{p} \delta_{ij} - \bar{\tau}_{ij} - \bar{\tau}_{ij}^t) \\ & - \bar{F}_{drag} + \bar{\Gamma} \tilde{u}_i \end{aligned} \quad (5.2)$$

where \tilde{u} is the filtered gas velocity vector, \bar{p} pressure and δ_{ij} the Kronecker symbol. $\bar{\Gamma}$ is the filtered evaporation source term and \bar{F}_{drag} is the filtered drag acting on the gas from the liquid phase. A model is proposed for these two terms in Section 5.1.2.2. Finally, $\bar{\tau}_{ij}$ and $\bar{\tau}_{ij}^t = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$



respectively denote the filtered viscous fluxes and the non-resolved turbulent fluxes whose formulation is given in Section 5.1.2.3.

The transport equation of the filtered species mass fractions $\tilde{Y}_{k=1,N}$ writes as :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_k}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k) = - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{J_{j,k}} + \overline{J_{j,k}^t}] + \bar{\Gamma}_k + \bar{\rho} \tilde{\omega}_k \quad (5.3)$$

where $\overline{J_{i,k}}$ and $\overline{J_{i,k}^t} = -\bar{\rho} (\overline{u_i Y_k} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)$ respectively denote the filtered laminar diffusive fluxes and the non resolved turbulent fluxes of species k which are given in Section 5.1.2.3. The filtered evaporation source term $\bar{\Gamma}_k$ is non-zero only for the fuel species. The species source term due to chemical reactions $\tilde{\omega}_k$ is determined using dedicated combustion models presented in Section 5.1.3.

The total non-chemical filtered energy \tilde{E} is computed through the following transport equation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{E}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{E}) = & - \frac{\partial}{\partial x_j} [\overline{u_i (\bar{\rho} \delta_{i,j} - \tau_{i,j})} + \bar{q}_j + \bar{q}_j^t] \\ & + \bar{\rho} \tilde{\omega}_T + \dot{S}_E \end{aligned} \quad (5.4)$$

where \dot{S}_E denotes the contribution of the liquid phase to the energy transport equation and writes :

$$\dot{S}_E = \bar{\Lambda} + \bar{\Phi} + \frac{1}{2} \bar{\Gamma} \tilde{u}_{l,i}^2 - \bar{F}_{drag} \tilde{u}_{l,i} \quad (5.5)$$

with \tilde{u}_l the filtered liquid velocity. The terms $\bar{\Lambda}$ and $\bar{\Phi}$ respectively stand for the filtered enthalpy transfer by phase change and the thermal conduction. Their closure is proposed in Section 5.1.2.2. The terms $1/2 \bar{\Gamma} \tilde{u}_{l,i}^2$ and $\bar{F}_{drag} \tilde{u}_{l,i}$ describe the filtered kinetic energy transfer by evaporation and drag force. Finally, the closures for the filtered laminar and non-resolved turbulent energy fluxes, respectively \bar{q}_i and $\bar{q}_i^t = -\bar{\rho} (\overline{u_i E} - \tilde{u}_i \tilde{E})$ are given in Section 5.1.2.3. The chemical source term $\tilde{\omega}_T$ is expressed from the formation enthalpies $h_{f,k}^0$ at the reference temperature of 0 K and the filtered species reaction rates $\tilde{\omega}_k$ as :

$$\tilde{\omega}_T = \sum_{k=1}^N h_{f,k}^0 \tilde{\omega}_k \quad (5.6)$$

5.1.2.2 Liquid phase modelling

The liquid phase is modelled using a mesoscopic Eulerian LES formalism (MEF) following the approach initially developed by [Fevrier et al. \(2005\)](#) and adapted for piston engine conditions by [Martinez et al. \(2010\)](#). Model transport equations are solved for the liquid mass, momentum and energy (not detailed here). The two-way coupling with the gas phase equations are achieved via the filtered evaporation source term $\bar{\Gamma}$, the filtered drag force \bar{F}_{drag} and the filtered enthalpy

transfer terms $\bar{\Lambda}$ and $\bar{\Phi}$. They are closed as in Spalding (1953) assuming spherical droplets with uniform temperature. They respectively write :

$$\bar{\Gamma} = \pi \bar{n}_l d \bar{Sh} \frac{\bar{\mu}}{Sc} \ln(1 + \bar{B}_M) \quad (5.7)$$

$$\bar{\Lambda} = \bar{\Gamma} h_{s,F}(T_l) \quad (5.8)$$

$$\bar{\Phi} = \pi \bar{n}_l d \bar{Nu} \bar{\lambda} (T_l - \tilde{T}) \quad (5.9)$$

$$\bar{F}_{drag} = \frac{\bar{\alpha}_l \rho_l}{\tau_p} (\tilde{u}_i - u_{l,i}) \quad (5.10)$$

In these equations, \bar{n}_l represents the filtered droplet density, d the droplet diameter, ρ_l the liquid density, $\bar{\alpha}_l$ the filtered liquid volume fraction and $h_{s,F}$ the sensible enthalpy of the liquid fuel at the reference temperature T_l . The Sherwood number \bar{Sh} , the mass Spalding number \bar{B}_M , the Nusselt number \bar{Nu} and the particle relaxation time τ_p are described in Sect. 3. The Schmidt number Sc is set to 0.75 for all species. Finally, the gas molecular viscosity $\bar{\mu}$ and the thermal conductivity $\bar{\lambda}$ are respectively computed using Eq. (5.12) and (5.17).

The liquid flow in the immediate vicinity of the injector nozzle is not resolved, and the DITurBC approach (Martinez et al., 2010) is used. As shown in Fig. 5.3 it displaces the injection boundary condition downstream of the nozzle and imposes liquid and gas velocity profiles using correlations based on liquid characteristics, thermodynamic conditions in the chamber, injection pressure and nozzle geometry. It avoids resolving the dense spray regions and the breakup processes that occur close to the nozzle.

5.1.2.3 Modelling resolved and subgrid-scale transport terms

The filtered viscous flux $\bar{\tau}_{ij}$ is computed as :

$$\bar{\tau}_{ij} = 2\bar{\mu} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{nn} \right) \quad (5.11)$$

The molecular gas viscosity $\bar{\mu}$ is determined using a Sutherland law (Sutherland, 1893) assuming the viscosity to be independent of the gas composition and close to that of air yielding :

$$\bar{\mu} = c_1 \frac{T^{3/2}}{\tilde{T} + c_2} \frac{T_{ref} + c_2}{T_{ref}^{3/2}} \quad (5.12)$$

with $c_1 = 1.71 \cdot 10^{-5} \text{ kg.m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$, $c_2 = 110.4\text{K}$ and $T_{ref} = 273\text{K}$ (Williams, 1985).

The filtered stress tensor \tilde{S} writes :

$$\tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (5.13)$$



The filtered laminar diffusive fluxes $\overline{J_{i,k}}$ of the species k is computed with the Hirschfelder and Curtis approach (Hirschfelder et al., 1969). It is a first-order multispecies diffusion law approximation of the exact expression (Giovangigli, 1999). It writes :

$$\overline{J_{i,k}} = \bar{\rho} \left(D_k \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \frac{W_k}{W} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \quad (5.14)$$

with D_k , \tilde{X}_k and W_k respectively denoting the diffusion coefficient, the molar fraction and the molar weight of species k . W stands for the mean molar weight of the local mixture and V_i^c is a correction term to ensure mass conservation that writes :

$$\tilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \frac{W_k}{W} \quad (5.15)$$

Finally the filtered laminar heat flux follows as :

$$\overline{q_i} = -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}} h_{s,k} \quad (5.16)$$

with $h_{s,k}$ the sensible enthalpy of species k , tabulated as a function of the temperature in the CFD code. The heat conduction coefficient of the gas mixture is computed by introducing the molecular Prandtl number Pr of the mixture as :

$$\bar{\lambda} = \frac{\bar{\mu} \bar{C}_p}{Pr} \quad (5.17)$$

Pr is assumed constant and set to 0.75. \bar{C}_p is the filtered calorific capacity determined following :

$$\bar{C}_p = \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} = \sum_{k=1}^N \tilde{Y}_k C_{p,k} \quad (5.18)$$

The subgrid-scale Reynolds tensor $\overline{\tau_{ij}^t}$ is modelled following Boussinesq's approximation as :

$$\overline{\tau_{ij}^t} = 2\bar{\rho}\nu^t \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{nn} \right) \quad (5.19)$$

with the turbulent viscosity ν^t , computed in the present study using the constant coefficient Smagorinsky model (Smagorinsky, 1963). The turbulent viscosity is assumed to be proportional to the product of a distance and a speed and writes :

$$\nu^t = (C_s \Delta^2) \sqrt{S_{ij} S_{ij}} \quad (5.20)$$

with C_s the Smagorinsky constant set to 0.18 in this study.

The non-resolved transport $\overline{J_{i,k}^t}$ of species k is modelled based on a gradient model similar to a Fick law :

$$\overline{J_{i,k}^t} = D_k^t \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial x_i} \quad (5.21)$$

with the turbulent diffusion coefficient D_k^t of species k defined as :

$$D_k^t = \frac{\nu^t}{\text{Sc}_k^t} \quad (5.22)$$

and the turbulent Schmidt number Sc_k^t of species k , set equal to 0.6 in the present study.

Finally, the modelling of the subgrid-scale turbulent heat flux \bar{q}_i^t writes :

$$\bar{q}_i^t = -\lambda^t \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \bar{J}_{i,k}^t \tilde{h}_{s,k} \quad (5.23)$$

with λ^t the subgrid-scale turbulent heat conduction expressed as :

$$\lambda^t = \bar{\rho} \frac{\nu^t \bar{C}_p}{\text{Pr}^t} \quad (5.24)$$

where Pr^t is the turbulent Prantdl number set equal to 0.6.

5.1.3 LES models for non-premixed combustion based on tabulated chemistry

5.1.3.1 Common principles of the chemistry tabulation approaches

The common principle of the combustion models proposed in the present study is to generate a chemistry database from simulations of auto-igniting adiabatic homogeneous reactors (HR) at constant pressure computed using detailed chemistry. The HR are initialised with a mixture of fuel and air taken at an initial unburnt state characterised by the mixture fraction Z , the initial fresh gases temperature T_u and the pressure p . The evolution of the combustion is stored for each HR as a function of a chemical progress variable c . According to [Gicquel et al. \(2000\)](#) the following definition of c is chosen to ensure a monotonic evolution with time :

$$c = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}} = \frac{Y_{CO} + Y_{CO_2}}{Y_{CO}^{eq} + Y_{CO_2}^{eq}} \quad (5.25)$$

where the superscript eq refers to the equilibrium state reached by a given initial mixture. Repeating these HR simulations for different discrete values of the parameters characterising the initial state allows building a look-up table that contains the evolutions as a function of c or t of the species mass fractions and reaction rates in the form :

$$Y_i^{HR} = Y_i(c, Z, T_u, p) \quad (5.26)$$

$$\dot{\omega}_{Y_c}^{HR} = \dot{\omega}_{Y_c}(c, Z, T_u, p) \quad (5.27)$$

This homogeneous look-up table is then used in different ways to build the two proposed LES combustion models and obtain the final filtered tabulated mass fractions \tilde{Y}_i^{model} for the transported species.



In a compressible CFD code, directly imposing species mass fractions and temperature from the look-up table would impede energy and density variations due to acoustic wave propagation. It has been shown (Michel et al., 2010) that directly imposing the reaction rates of the transported species from the chemistry table leads to important deviations from the look-up table trajectories. In order to avoid this, a relaxation procedure proposed by Michel et al. (2010) is used in the present study to estimate the filtered reaction rates from the tabulated species mass fraction as :

$$\tilde{\omega}_i = \frac{\tilde{Y}_i^{model} (\tilde{c} + \delta_c) - \tilde{Y}_i}{\tau_r} \quad (5.28)$$

As proposed in Michel et al. (2010) the relaxation time τ_r is fixed to $\tau_r = 5dt$, where dt is the time step used in the explicit time advancement of AVBP. This choice results from a compromise between the need to ensure that the mass fractions in the CFD code \tilde{Y}_i follow as closely as possible the tabulated trajectories \tilde{Y}_i^{model} (which requires relaxation times as small as possible), and the requirement that the relaxation procedure is stable (which is ensured for $\tau_r > dt$). The increment δ_c of the progress variable after a time interval $\delta t = \tau_r$ is estimated as :

$$\delta_c = \tau_r \frac{\tilde{\omega}_{Y_c}^{model}}{Y_c^{eq}} \quad (5.29)$$

where $\tilde{\omega}_{Y_c}^{model}$ is the reaction rate of Y_c extracted from the model look-up table read into the CFD code.

As it is impossible for practical reasons to transport all the species composing a detailed chemical scheme, only a reduced set is transported in the CFD code. This reduced set is chosen to ensure that its mass and enthalpy are as close as possible to those of the complete, not transported, mixture. Following Galpin et al. (2008), we chose a reduced set of 9 species for representing the mixtures of the present study : $C_{10}H_{22}$, O_2 , N_2 , CO_2 , H_2O , CO , H_2 , H and C_7H_{14} . The species $C_{10}H_{22}$ denotes the considered fuel mixture of 30% α -methylnaphthalene and 70% n-decane. In order to ensure mass conservation and reduce the look-up table size, only 5 species are tabulated : $C_{10}H_{22}$, CO_2 , H_2O , CO and H . The remaining species O_2 , H_2 and C_7H_{14} are reconstructed using atomic balance for O , C and H . As NO_x formation is not taken into account in the present study, N_2 is considered as an inert species and is therefore neither tabulated nor reconstructed, but only transported. The mass of the species contained in the original complex chemistry scheme and not transported in the CFD code is hereby accounted for via the reconstructed species. As a result, the mass fractions of the latter can significantly differ from those given by complex chemistry. This is especially true in early phases of auto-ignition and combustion, and in particular for C_7H_{14} , as it represents the mass of all intermediate hydrocarbons formed in the initial phases of combustion characterised by fuel decomposition.

5.1.3.2 Characterising local mixture state as input to tabulated chemistry

The local fresh gases mixture and thermodynamic state must be fully characterised to use the chemistry look-up tables during the LES computation. This is achieved by transporting additional model equations that allow determining the necessary input parameters for the look-up table.

Filtered mixture fraction and variance The local mixture state is determined by solving a model transport equation for the filtered mixture fraction \tilde{Z} as :

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \left(\frac{\nu}{Sc} + \frac{\nu^t}{Sc^t} \right) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] + \bar{\Gamma} \quad (5.30)$$

Accounting for subgrid-scale mixture inhomogeneity requires in addition the determination of the mixture fraction segregation factor S_Z as :

$$S_Z = \frac{Z_v}{\tilde{Z} (Z_s - \tilde{Z})} \quad (5.31)$$

where Z_s is mixture fraction at fuel saturation. The mixture fraction variance Z_v is obtained through the following transport equation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} Z_v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}_v) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \left(\frac{\nu}{Sc} + \frac{\nu^t}{Sc^t} \right) \frac{\partial Z_v}{\partial x_j} \right] + 2\bar{\rho} \left(\frac{\nu}{Sc} + \frac{\nu^t}{Sc^t} \right) \left| \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right|^2 \\ &- 2\rho D \left| \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right|^2 + \bar{\rho} \tilde{\omega}_{Z_v}^{TPF} \end{aligned} \quad (5.32)$$

The closure of the filtered scalar dissipation rate $\bar{\rho} \tilde{\chi} = \overline{\rho D |\nabla Z|^2}$ is discussed in Section 5.1.3.4. The variance source term due to evaporation $\tilde{\omega}_{Z_v}^{TPF}$ is modelled following [Pera et al. \(2006\)](#), with a coefficient $\alpha_{\dot{w}}$ set to 0.5.

$$\tilde{\omega}_{Z_v}^{TPF} = 2\alpha_{\dot{w}} Z_v \left(\frac{\bar{\Gamma}}{\tilde{Z}} \right) \quad (5.33)$$

Filtered fresh gases temperature The filtered temperature \tilde{T}_u (neglecting subgrid-scale fluctuations) entering the chemical database is determined by solving a model transport equation for the fresh gases enthalpy ([Jay and Colin, 2011](#)) as :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{H}_u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{H}_u) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \left(\frac{\nu}{Pr} + \frac{\nu^t}{Pr^t} \right) \frac{\partial \tilde{H}_u}{\partial x_j} \right] \\ &+ \frac{\tau_{ij} \partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\bar{\rho}}{\rho_u} \frac{D\bar{p}}{Dt} \\ &+ \bar{\Gamma} (\tilde{H} - \tilde{H}_u) + \bar{S}_{H_u} \end{aligned} \quad (5.34)$$



The evaporation source term $\overline{\dot{S}}_{H_u}$ is modelled as

$$\overline{\dot{S}}_{H_u} = \overline{\Lambda} + \overline{\Phi} \quad (5.35)$$

where $\overline{\Lambda}$ and $\overline{\Phi}$ are respectively defined by Eq. (5.8) and Eq. (5.9). The local fresh gas temperature is finally deduced from the fresh gas enthalpy using the local fresh gases mass fractions, for which model transport equations are solved. They have the form given in Eq. (5.3), with all source terms due to combustion set to zero. As for the filtered composition, not all species are actually transported : it is assumed that H and C_7H_{14} are zero in the fresh gases, and only transport equations for the mass fractions of $C_{10}H_{22}$, O_2 and CO in the fresh gases are solved. N_2 is assumed constant, and the fresh gases mass fractions of CO_2 , H_2O and H_2 are obtained by atomic balances for C , O and H .

Subgrid-scale temperature stratification In combustion models accounting for subgrid mixture stratification, accounting for the subgrid-scale temperature stratification is mandatory. A classical approximation is to assume a linear dependency of the subgrid-scale fresh gases temperature with mixture fraction. Despite this represents a strongly simplifying hypothesis, as it assumes constant heat capacities and diffusion coefficients (Domingo et al., 2008), and neglects mass and heat exchanges related to fuel evaporation, it is also used in the present paper : $T_u(Z)$ is assumed to be linear. As shown in Fig. 5.1, within the CFD code it is hereby necessary to reconstruct the local subgrid-scale temperature stratification $\widetilde{T}_u(Z)$ based on local fresh gases conditions. This requires knowing two out of three characteristic temperatures : the filtered fresh gases temperature $\widetilde{T}_u(Z = \widetilde{Z})$, the filtered liquid fuel temperature at the fuel saturation $\widetilde{T}_f = \widetilde{T}_u(Z = Z_s)$ or the filtered fresh air temperature $\widetilde{T}_a = \widetilde{T}_u(Z = 0)$. We found that the more appropriate results are obtained when extrapolating \widetilde{T}_f from $\widetilde{T}_u(Z = \widetilde{Z})$ (modelled as described in Section 5.1.3.2) and \widetilde{T}_a , determined based on a model transport equation for the filtered fresh air enthalpy \widetilde{H}_a in the form :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{\rho} \widetilde{H}_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{\rho} \widetilde{u}_j \widetilde{H}_a \right) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\overline{\rho} \left(\frac{\nu}{\text{Pr}} + \frac{\nu^t}{\text{Pr}^t} \right) \frac{\partial \widetilde{H}_a}{\partial x_j} \right] \\ &+ \frac{\tau_{ij}}{\rho_a} \frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\overline{\rho}}{\rho_a} \frac{D\overline{\rho}}{Dt} \\ &+ \overline{\Gamma} \left(\widetilde{H} - \widetilde{H}_a \right) + \overline{\dot{S}}_{H_a} \end{aligned} \quad (5.36)$$

which is similar to Eq. (5.34), except for the source term :

$$\overline{\dot{S}}_{H_a} = \overline{\Phi} \quad (5.37)$$

\widetilde{H}_a represents a fictive fresh air state at $Z = 0$ (i.e. not affected by fuel evaporation) in a mixture of air and fuel droplets. Eq. (5.37) thus results from the assumption that it is not affected by evaporated fuel, so that the $\overline{\Lambda}$ term from Eq. (5.8) is neglected (while it is accounted for in Eq. (5.35) for \widetilde{H}_u), but senses the heat flux related to evaporation, so that the $\overline{\Phi}$ term from Eq. (5.9) is retained.

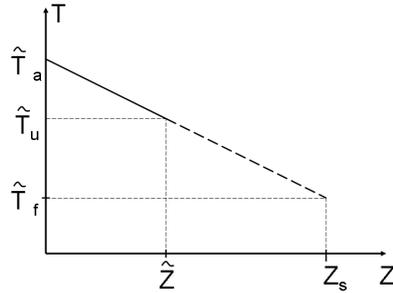


FIGURE 5.1 – Scheme of the extrapolation of the fuel temperature \widetilde{T}_f from the fresh air \widetilde{T}_a and fresh gases temperature \widetilde{T}_u .

The filtered fresh gas temperature \widetilde{T}_u is then used with \widetilde{T}_a to linearly extrapolate \widetilde{T}_f (Fig. 5.1).

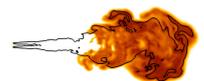
5.1.3.3 The THR and THR-PDF models

The general principle of the tabulated homogeneous reactors (THR) models is to assume that the local structure of the reaction zone can be approximated by homogeneous reactors : the THR model assumes homogeneous mixture fraction at the filter size, while the THR-PDF model considers subgrid scale mixture fraction fluctuations.

The THR model The THR model assumes that mixture fraction is uniform at the LES filter size, so that its probability density function (PDF) corresponds to a Dirac δ function centered on the filtered mixture fraction. The HR look-up table described in Section 5.1.3.1 is then directly used :

$$\begin{aligned} \widetilde{Y}_i^{THR}(t, \widetilde{Z}, \widetilde{T}_u, \widetilde{p}) &= \int_{Z=0}^{Z=Z_s} Y_i^{HR}(t, Z, \widetilde{T}_u, \widetilde{p}) \delta(Z - \widetilde{Z}) dZ \\ &= Y_i^{HR}(t, \widetilde{Z}, \widetilde{T}_u, \widetilde{p}) \end{aligned} \quad (5.38)$$

$$\begin{aligned} \widetilde{\omega}_{Y_c}^{THR}(t, \widetilde{Z}, \widetilde{T}_u, \widetilde{p}) &= \int_{Z=0}^{Z=Z_s} \frac{\partial Y_c^{HR}}{\partial t}(t, Z, \widetilde{T}_u, \widetilde{p}) \delta(Z - \widetilde{Z}) dZ \\ &= \frac{\partial Y_c^{HR}}{\partial t}(t, \widetilde{Z}, \widetilde{T}_u, \widetilde{p}) \end{aligned} \quad (5.39)$$



The filtered progress variable \tilde{c} (Eq. 5.25) is then reconstructed using filtered mass fraction of Y_{CO}^{THR} and $Y_{CO_2}^{THR}$ (Eq. 5.38) to parametrise the look-up table as a function of \tilde{c} , \tilde{Z} , \tilde{T}_u and \tilde{p} . The modelled mass fractions from Eq. (5.38) are implemented into the relaxation procedure (Eq. 5.28) to estimate the filtered species reaction rates in the CFD code. The reaction rate in Eq. (5.39) is used to advance the filtered progress variable. This procedure is identically applied for the other proposed models.

The THR-PDF model The THR-PDF model proposes relaxing the strong assumption of homogeneous reacting mixtures retained in the THR model. This is achieved by considering a statistical distribution of mixture fractions between $Z = 0$ (pure air) and the mixture fraction limit given by $Z = Z_s$ at the filter size scale, modelled via a β -function. THR-PDF views the reaction zone at subgrid-scale as a collection of independent individual homogeneous reactors. The β function is parametrised by the filtered mixture fraction \tilde{Z} , its segregation factor S_Z and the local mixture fraction Z . For convenience this probability density function is written as $P(Z)$. The model species mass fractions and chemical progress reaction rates are modelled as :

$$\tilde{Y}_i^{THR-PDF}(t, \tilde{Z}, S_Z, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, \tilde{p}) = \int_{Z=0}^{Z=Z_s} Y_i^{HR}(t, Z, \tilde{T}_u(Z), \tilde{p}) \tilde{P}(Z) dZ \quad (5.40)$$

$$\tilde{\omega}_{Y_c}^{THR-PDF}(t, \tilde{Z}, S_Z, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, \tilde{p}) = \int_{Z=0}^{Z=Z_s} \frac{\partial Y_c^{HR}}{\partial t}(t, Z, \tilde{T}_u(Z), \tilde{p}) \tilde{P}(Z) dZ \quad (5.41)$$

The filtered subgrid-scale temperature $\tilde{T}_u(Z)$ is considered linear and parametrised using its extremum values \tilde{T}_a and \tilde{T}_f as described in Section 5.1.3.2. The integration over the PDF is performed off-line from the CFD code and at iso time for each mixture fraction.

5.1.3.4 The ADF and ADF-PCM models

The ADF and ADF-PCM models assume that the subgrid-scale structure of the reaction zone corresponds to auto-igniting strained laminar diffusion flames. The latter are tabulated using 1D approximated diffusion flames (ADF) (Michel et al., 2008) in counterflow configuration at constant pressure and fresh gas temperature. This approach allows using detailed chemistry schemes at low CPU cost. Its principle is to resolve the flamelet equation of Peters (1984) for the progress variable Y_c :

$$\frac{\partial Y_c}{\partial t} = \dot{\omega}_{Y_c} + \chi \frac{\partial^2 Y_c}{\partial Z^2} \quad (5.42)$$

As shown in Fig. 5.2, the reaction rate $\dot{\omega}_{Y_c}$ is extracted from a homogeneous reactor look-up table at constant pressure using the progress variable c^{ADF} (Eq. 5.25) of the flamelet :

$$\dot{\omega}_{Y_c} = \dot{\omega}_{Y_c}^{HR}(c^{ADF}, Z, T_u, p) \quad (5.43)$$

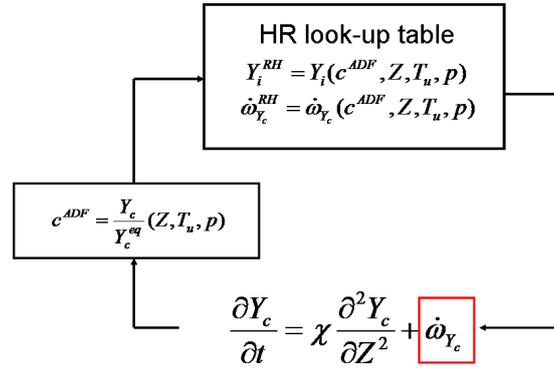


FIGURE 5.2 – Scheme of the ADF approach.

The scalar dissipation rate χ controlling mixing is defined as :

$$\chi = D \left(\frac{\partial Z}{\partial x} \right)^2 \quad (5.44)$$

The flamelet equation (Eq. 5.42) is solved for different pressures, temperatures stratifications and strain rates a . It has been chosen to parametrise the flamelet because it does not depend on the mixture fraction value for counterflow configuration and is generally used for diffusion flame calculations. It is computed assuming a counterflow diffusion flame (Peters, 2000) :

$$\chi = \frac{a}{2\pi} \exp \left(-2 \left[\text{erf}^{-1}(1 - 2Z) \right]^2 \right) = aF(Z) \quad (5.45)$$

This finally allows building an ADF look-up table containing the species mass fractions extracted from the HR look-up table from Eq. (5.26) :

$$Y_i^{flamelet}(t, Z, T_u(Z), p, a) = Y_i^{HR}(c^{ADF}, Z, T_u, p) \quad (5.46)$$

The result is an ADF look-up table that is completed by storing the progress variable variation rate of the flamelet progress variable taken from Eq. (5.42) :

$$\dot{\omega}_{Y_c}^{flamelet}(t, Z, T_u(Z), p, a) = \frac{\partial Y_c^{flamelet}}{\partial t}(t, Z, T_u(Z), p, a) \quad (5.47)$$

Finally, the general principle of the ADF and ADF-PCM models is to build the filtered species mass fractions and progress reaction rates by integrating the flamelet table over a presumed PDF of mixture fraction.

The ADF model The ADF model assumes that mixture fraction is homogeneous at the LES filter size, so that a Dirac function is used to represents the mixture fraction distribution.



$$\begin{aligned}
\tilde{Y}_i^{ADF} (t, \tilde{Z}, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, \bar{p}, a) &= \int_{Z=0}^{Z=Z_s} Y_i^{flamelet} (t, Z, \tilde{T}_u(Z), \bar{p}, a) \delta (Z - \tilde{Z}) dZ \\
&= Y_i^{flamelet} (t, \tilde{Z}, \tilde{T}_u(\tilde{Z}), \bar{p}, a)
\end{aligned} \tag{5.48}$$

$$\begin{aligned}
\tilde{\omega}_{Y_c}^{ADF} (t, \tilde{Z}, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, \bar{p}, a) &= \int_{Z=0}^{Z=Z_s} \tilde{\omega}_{Y_c}^{flamelet} (t, Z, \tilde{T}_u(Z), \bar{p}, a) \delta (Z - \tilde{Z}) dZ \\
&= \tilde{\omega}_{Y_c}^{flamelet} (t, \tilde{Z}, \tilde{T}_u(\tilde{Z}), \bar{p}, a)
\end{aligned} \tag{5.49}$$

To obtain the strain rate a in the CFD code, the scalar dissipation rate is modelled as shown in Section 5.1.3.4. The relaxation procedure from Eq. (5.28) is used to close the filtered species reaction rates in the CFD code. The subgrid-scale temperature stratification is modelled as described in Section 5.1.3.2.

The ADF-PCM model The ADF-PCM model proposes accounting for subgrid-scale mixture fraction variations by using a presumed β -PDF :

$$\tilde{Y}_i^{ADF-PCM} (t, \tilde{Z}, S_Z, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, \bar{p}, a) = \int_{Z=0}^{Z_s} Y_i^{flamelet} (t, Z, \tilde{T}_u(Z), \bar{p}, a) P(Z) dZ \tag{5.50}$$

$$\tilde{\omega}_{Y_c}^{ADF-PCM} (t, \tilde{Z}, S_Z, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, \bar{p}, a) = \int_{Z=0}^{Z_s} \tilde{\omega}_{Y_c}^{flamelet} (t, Z, \tilde{T}_u(Z), \bar{p}, a) P(Z) dZ \tag{5.51}$$

It should be noted that this model assumes that the flame responds instantaneously to scalar dissipation rate variations.

Scalar dissipation rate modelling The scalar dissipation rate measures the rate at which fuel and oxidizer mix, and therefore has a strong influence on the flamelet ignition and structure (Michel et al., 2008). The filtered scalar dissipation rate $\tilde{\chi}$ computed in the CFD code can be decomposed into a resolved and subgrid parts as :

$$\begin{aligned}
\bar{\rho} \tilde{\chi} &= \overline{\rho D |\nabla Z|^2} \\
&= \bar{\rho} D |\nabla \tilde{Z}|^2 + \left(\overline{\rho D |\nabla Z|^2} - \bar{\rho} D |\nabla \tilde{Z}|^2 \right) \\
&= \bar{\rho} \tilde{\chi}_{RES} + \bar{\rho} \tilde{\chi}_{SGS}
\end{aligned} \tag{5.52}$$

The resolved part is directly computed from the filtered mixture fraction fields. The subgrid part is closed according to a classical equilibrium hypothesis between production and dissipation (Pierce and Moin, 1998) of the mixture fraction segregation, leading to a linear relaxation of Z_v :

$$\chi_{SGS} = \frac{D^t}{\Delta^2} Z_v \tag{5.53}$$

with Δ the characteristic size of the filter equal to the cubic square of the cell volume and $D^t = \nu^t / Sc^t$ the turbulent diffusivity.

5.1.4 LES of an auto-igniting liquid jet

The above described models were applied to the LES of an auto-igniting liquid spray injected under Diesel-like conditions into a constant volume chamber.

5.1.4.1 Configuration

The simulated experiment consists of a liquid α -methylnaphtalene/n-decane fuel injected into a constant volume chamber of approximately cubic shape with an edge length of 112 mm (Bruneaux, 2008; Bruneaux and Maligne, 2009). The gas mixture inside the chamber is initially at rest and the temperature and pressure levels at the moment of injection are close to those found in a Diesel engine, thanks to a pre-combustion phase. The chamber walls are equipped with optical accesses allowing in particular using quantitative LIEF (Laser Induced Exciplex Fluorescence) measurements of fuel vapour mass fractions in the absence of combustion. Global heat release is indirectly monitored by following the temporal evolution of the mean chamber pressure.

Initial conditions in the chamber	
Pressure	66.75 bar
Temperature	950 K
Non-reactive case composition	Nitrogen
Reactive case composition	Air
Injection characteristics	
Injection pressure	1200 bar
Injected mass	2.44 mg $\pm 10\%$
Liquid temperature	400 K
Injection duration	350 μs
Fuel injected (mass ratio)	30% α -methylnaphtalene 70% n-decane

TABLE 5.1 – Experimental conditions of the auto-igniting liquid jet configuration

Table 5.1 presents the main characteristics of the two simulated cases. For the non-reactive case, fuel is injected into a chamber filled with nitrogen, thus avoiding auto-ignition and allowing quantifying the fuel vapour mass fraction distribution in the jet at different instants. For the reactive case, the presence of air allows studying auto-ignition and combustion. It should be underlined that the real composition at the start of injection is more complex, as it also includes the products resulting from the pre-combustion to reach the desired initial temperature. This was neglected in the present simulations. The injection duration is rather short, making this jet



representative of a pilot injection in a Diesel engine.

5.1.4.2 Numerical set-up

The described models were implemented into the fully compressible AVBP LES flow solver for unstructured hybrid meshes (Moureau et al., 2005). In the present simulations, convection is resolved using a second order centered explicit Lax-Wendroff scheme (Lax and Wendroff, 1960) based on an acoustic timestep. The unclosed convective terms resulting from LES filtering are modelled using a constant coefficient Smagorinsky model (Smagorinsky, 1963) with $C_S = 0.18$.

As outlined above, the liquid phase is simulated using a mesoscopic Eulerian formalism. In order to avoid resolving the dense liquid zone close to the injector nozzle, the DITurBC approach (Martinez et al., 2010) was used. It relies on algebraic expressions relating the features of the injector with the flow characteristics at a distance downstream of the nozzle exit, where phenomena as primary break-up do not play a role anymore, and where the liquid volume fraction is small enough to allow applying the available Eulerian formalism for the liquid phase.

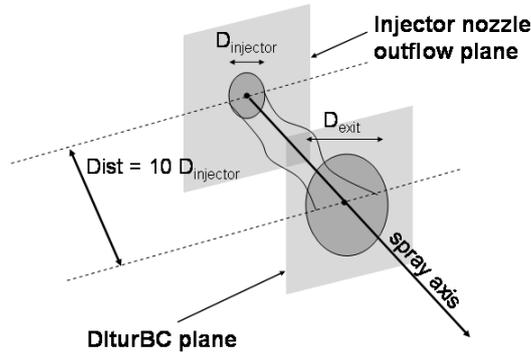


FIGURE 5.3 – Illustration of the principle of the DITurBC approach (Martinez et al., 2010). The flow conditions are imposed on the DITurBC plane instead of on the nozzle outflow. The flow between the outflow plane and the DITurBC plane is not resolved.

As illustrated in Fig. 5.3, the boundary conditions are imposed at the end of a cone with a small base located on the nozzle outflow plane, and with a height of 10 times the nozzle diameter. Gaussian shapes for the gas and liquid velocities are imposed on the DITurBC plane, while the droplet diameter and liquid density are considered constant. Fluctuating velocities are added to mimic the turbulence on the DITurBC outflow plane, using the RFG approach (Smirnov et al., 2001) based on Kraichnan (1970). These velocities are selected using a random number generator, changing its seed from realisation to realisation. This method mimics the variability of injector outflow, while preserving the injected mass and the introduction rate.

The flow inside the cone is not resolved, and its boundaries are approximated by solid free-

slip walls. This approach simplifies the near-nozzle flow and the related air entrainment, but former applications under comparable conditions (Martinez et al., 2010) have yielded satisfactory predictions.

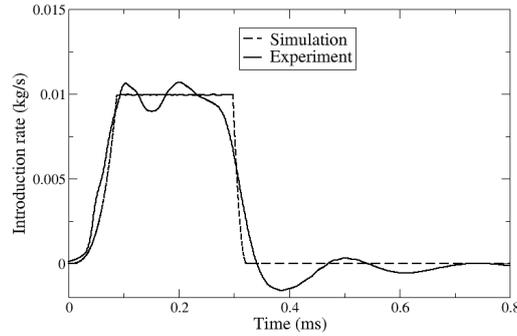


FIGURE 5.4 – Experimental averaged introduction rate, and simplified shape imposed in the LES.

A major parameter for the injector model is the introduction rate, i.e. the liquid fuel mass injected per unit time into the chamber. Figure 5.4 shows the experimentally observed filtered averaged introduction rate, and the one imposed as boundary conditions in the present LES. The experimental introduction rate shows strong fluctuations, inducing non-physical negative values due to an oscillatory response of the sensor. For this reason, the introduction rate in the simulation is simplified to three phases : a constant mass flow rate phase, preceded and followed respectively by an opening and closing phase, both modelled as quadratic in time. It should be noted that the slopes of the opening and closing phases cannot precisely be determined from the measurements. The present choice allowed a satisfactory reproduction of experimental findings (see below) but one should keep in mind that simulation results exhibit a strong sensitivity to these parameters. The total injected fuel mass in the LES is 2.39 mg, very close to the experimental value of 2.42 mg.

Figure 5.5 shows a cut plane of the tetrahedral mesh used in the present LES in a symmetry plane of the injector. The mesh is refined around the jet axis, with a maximum resolution of 80 μm on the DITurBC cone outflow plane, which gradually increases downstream, reaching 800 μm at the end of the refined area at an axial distance of 70 mm from the injector nozzle. The mesh outside of this central refined zone rapidly coarsens towards the chamber walls, allowing limiting the overall mesh size for the whole chamber to 1.8 million cells.

The CPU time for 1 ms of physical time of the non-reactive case was 1.2 hours on 80 processors of a SGI Altix cluster, and reached 5.7 hours for the reactive case essentially because of the transport of additional species required for combustion modelling, and of a reduced timestep in



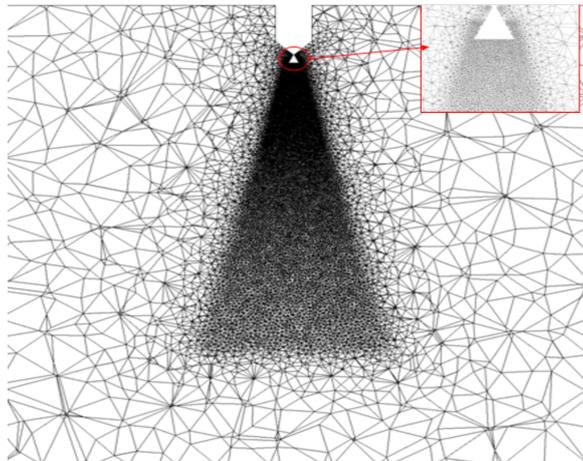


FIGURE 5.5 – Computational mesh in a cut plane through the injector, showing the refined region around the jet axis, and a close-up view of the DITurBC cone.

relation to the addition of combustion source terms.

5.1.4.3 Chemistry tabulation

The chemistry of the injected fuel mixture was tabulated as described above using the detailed chemical scheme of Wang et al. (2010), containing 3684 reactions and 662 species. This scheme has specifically been developed for α -methyl-naphthalene / n-decane mixtures at high pressures and temperatures. Table 5.2 shows the discretisation of the look-up table used for ADF-PCM. Other approaches use a comparable discretisation.

Input variable	Number of discretisation points	Range
Progress variable \tilde{c}	41	0 - 1
Mixture fraction \tilde{Z}	24	0 - 0.5
Mixture fraction segregation S_z	6	0 - 1
Air temperature \tilde{T}_a	4	950 - 750 K
Fuel temperature \tilde{T}_f	4	950 - 350 K
Pressure \bar{p}	3	60 - 80 bar
Strain rate a	11	0 - 8000 s^{-1}

TABLE 5.2 – Look-up table discretisation for each control parameter of the ADF-PCM model.

The discretisation points are equally spaced between the minimum and maximum values for T_u , T_f and p . In order to achieve a more adapted discretisation while keeping a reasonable size for the full table, the tabulation points are non-equally spaced for mixture fraction, for which they

are concentrated around stoichiometry, and for the progress variable, refined for small values. This allows accurately capturing auto-ignition and combustion. Finally, tabulation points are also more concentrated in regions of small values of strain rate and mixture fraction segregation factor. Note that the mixture fraction is discretised between 0 and 0.5 which is the mixture fraction limit Z_{lim} determined using non-reactive configuration results. It corresponds to the maximum encountered mixture fraction value. For the following, we consider the mixture fraction saturation Z_s equal to Z_{lim} .

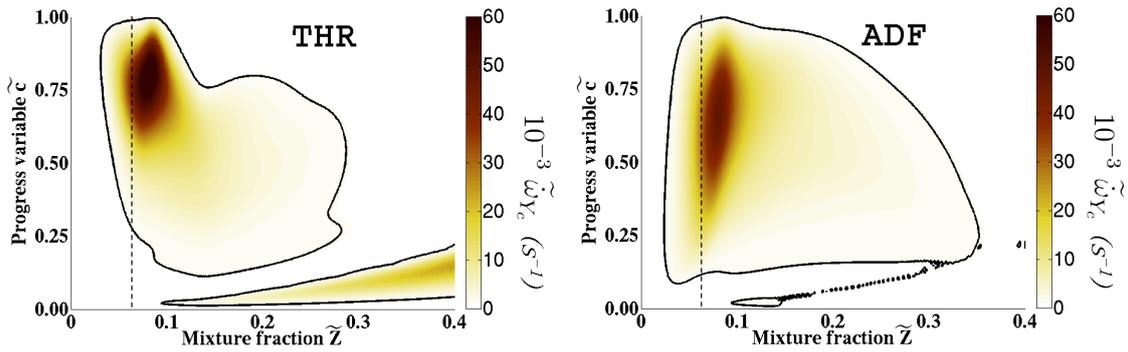


FIGURE 5.6 – Reaction rates of the progress variable ω_{Y_c} obtained using THR and ADF approaches. The following conditions are used : $\widetilde{T}_a = 900$ K, $\widetilde{T}_f = 700$ K, $p = 70$ bar and a strain rate of 1000 s $^{-1}$ for ADF. The black solid line represents an isoline of reaction rate of 1000 s $^{-1}$ and the vertical dashed line the mixture fraction stoichiometry ($Z_{st} = 0.062$).

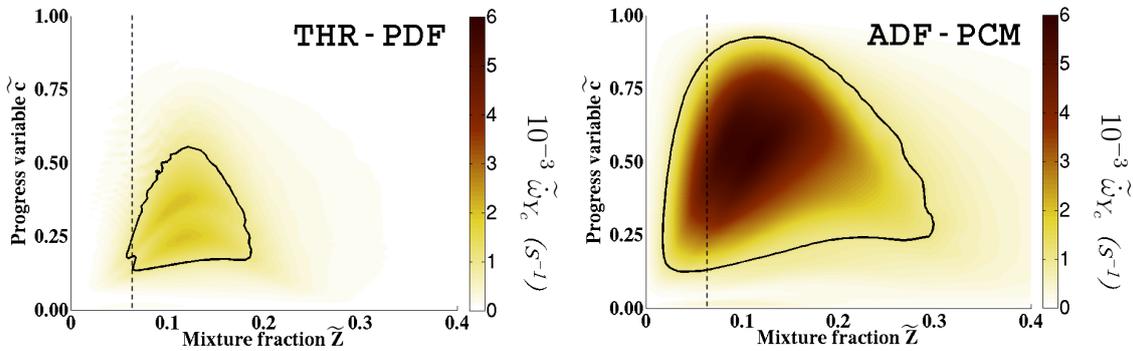


FIGURE 5.7 – Reaction rates of the progress variable ω_{Y_c} obtained using THR-PDF and ADF-PCM approaches. The following conditions are used : $\widetilde{T}_a = 900$ K, $\widetilde{T}_f = 700$ K, $p = 70$ bar, $S_Z = 0.05$ and a strain rate of 1000 s $^{-1}$ for ADF. The black solid line represents an isoline of reaction rate set to 1000 s $^{-1}$ and the vertical dashed line the mixture stoichiometry ($Z_{st} = 0.062$).

The obtained look-up tables for the different models are illustrated in Figs. 5.6 and 5.7 where the progress variable reaction rate $\widetilde{\omega}_{Y_c}$ is plotted as functions of \widetilde{Z} and \widetilde{c} for typical conditions found in the present experiment. Fig. 5.6 concerns the THR and ADF models that neglect subgrid-scale mixture fraction variance. The tables for both models exhibit two areas with high reaction rates. The first, apparent for low \widetilde{c} and for high mixture fractions, corresponds to cool flame



combustion. The second, characterised by high reaction rates at high \tilde{c} and for mixture fractions around stoichiometry, corresponds to the main combustion phase. Overall the THR look-up table exhibits higher maximum levels in both zones, a clearly marked cool flame region, and a main reaction zone that is rather narrow around the stoichiometry. In contrast, the ADF look-up table exhibits a comparatively smaller and less intense cool flame region, as well as a main combustion phase that is distributed over a broader \tilde{Z} and \tilde{c} range. This illustrates the impact of accounting for subgrid-scale diffusion in ADF, which is neglected when building the THR tables. Fig. 5.7 illustrates the look-up tables obtained for the THR-PDF and ADF-PCM models that account for the subgrid-scale mixture fraction distribution assuming a β -PDF. Shown are reaction rates obtained for $S_Z = 0.05$, a value typically predicted by the present LES in the reactive zone of the jet. As compared to the THR and ADF look-up tables, the filtered reaction rates are an order of magnitude lower for THR-PDF and ADF-PCM (note the difference in colour scale between Figs. 5.6 and 5.7), and the cool flame regions are not present anymore. The ADF-PCM look-up table shows that accounting for subgrid-scale mixture fraction variance leads to a more uniform distribution of reaction rates over mixture fraction. The THR-PDF look-up table also exhibits a much more homogeneous distribution of reaction rates than for THR, and a shift towards smaller \tilde{Z} and \tilde{c} values. Overall, THR-PDF exhibits the smallest reaction rates and narrowest combustion zone in \tilde{Z} and \tilde{c} space.

5.1.4.4 Estimating LES quality

The quality of the performed LES is estimated using Pope's criterion (Pope, 2004), evaluated for the non-reactive case. Hereby the quantity Q represents the proportion of the subgrid-scale kinetic energy as :

$$Q(x, t) = \frac{K_{sgs}}{K_{sgs} + K_{res}} \quad (5.54)$$

The average resolved turbulent kinetic energy K_{res} is determined as :

$$K_{res} = \frac{1}{2} \langle u_{rms}^2 + v_{rms}^2 + w_{rms}^2 \rangle \quad (5.55)$$

where the brackets denote an ensemble averaging over the achieved LES realisations and the underscript rms stands for root mean square defined, for a filtered quantity \tilde{f} with N realisations as :

$$f_{rms} = \sum_{b=1}^N \frac{\sqrt{(\tilde{f}_m - \tilde{f}_b)^2}}{N} \quad \text{with} \quad \tilde{f}_m = \sum_{b=1}^N \frac{\tilde{f}_b}{N} \quad (5.56)$$

where the b subscript denotes the realisation index.

The subgrid-scale turbulent kinetic energy is estimated using Lilly's closure (Lilly, 1967) as $K_{sgs} = (\nu^t)^2 / (c\Delta)^2$ with $c = 0.1$. A value of $Q = 1$ denotes a flow where all the turbulent

kinetic energy is modelled, corresponding to a RANS approach. On the other hand, $Q = 0$ indicates that all the local turbulent kinetic energy is resolved, i.e. identifies a DNS for the gas phase.

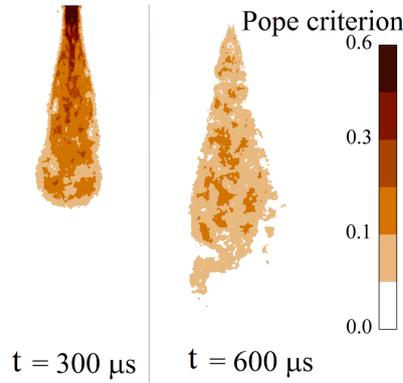


FIGURE 5.8 – Fields of Pope’s criterion Q in a cut plane through the injector at two instants after fuel injection for the non-reactive case.

Figure 5.8 shows fields of Pope’s criterion Q computed based on 15 LES realisations of the non-reactive case at two instants : one during the injection at $300 \mu\text{s}$, and the other after the end of the injection at $600 \mu\text{s}$. In early phases of injection at $300 \mu\text{s}$, the very high gas velocity gradients in the first 10 mm downstream of the DITurBC plane yield values of Q between 0.4 and 0.6, indicating that an around half of the total kinetic energy is modelled despite the refined mesh. Further downstream, and at $600 \mu\text{s}$ when the injection is finished, Q reaches values generally below 0.2, indicating a resolution of the gas phase that corresponds to the requirements set forward by Pope (2004).

However, this criterion should be interpreted with care, as it neglects turbulent energy dissipation by the numerical approach used to resolve the flow equations. In the extreme case of a highly dissipative numerical approach, K_{sgs} would tend to zero, wrongfully indicating that all flow scales were resolved. Nevertheless, the usage of a numerical approach in AVBP that has proven its low dissipation (Moureau et al., 2005) allows concluding that in the present LES a sufficient part of the flow kinetic energy of the gas phase appears to be resolved in most of the jet. Nevertheless, the resolution close to the DITurBC plane is too coarse in view of the very high gas velocity gradients found there. Improving this would require a much finer mesh, which would greatly increase the computational time, and was therefore not addressed in the present work.

5.1.5 Results and discussion

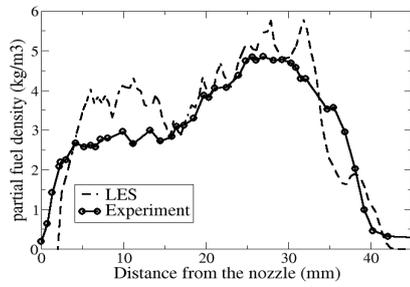
In this Section, the LES results are presented, discussed and compared to available experimental data. First, Section 5.1.5.1 analyses the fuel distribution predicted by the LES to validate the fuel injection. Section 5.1.5.2 then discusses the auto-ignition and spatial combustion propagation obtained with the discussed combustion models, based on single LES realisations. This is



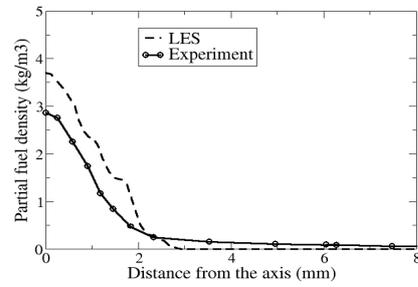
complemented in Section 5.1.5.3 by a comparison of the predicted auto-ignition delays with experiments. Finally, Section 5.1.5.4 proposes an analysis of the variability of ignition and combustion behaviour based on 15 realisations achieved with the ADF-PCM model.

5.1.5.1 Validating inert jet predictions

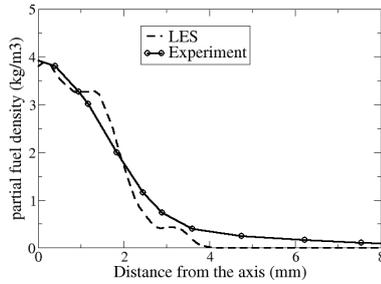
The modelling approach for the inert jet was first validated by comparing fuel partial density profiles predicted by LES with experimental data. Comparisons are performed at 500 μs , i.e. after the end of injection, and concern axial (5.9(a)) and radial profiles at 10 (Fig. 5.9(b)), 20 (Fig. 5.9(c)) and 30 mm (Fig. 5.9(d)) from the nozzle.



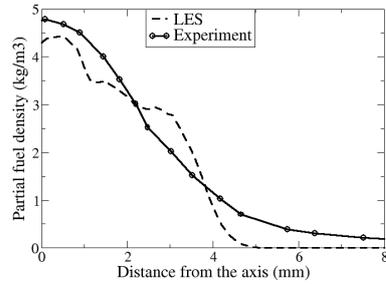
(a) axial evolution.



(b) radial evolution 10 mm from the nozzle.



(c) radial evolution 20 mm from the nozzle.



(d) radial evolution 30 mm from the nozzle.

FIGURE 5.9 – Ensemble-averaged fuel partial density profiles at $t = 500 \mu\text{s}$: (a) axial profiles on the central jet axis (b) radial profiles at 10 mm from the nozzle exit (c) radial profiles at 20 mm from the nozzle exit (d) radial profiles at 30 mm from the nozzle exit. Experiments were averaged over 50 realisations, LES over 15.

As illustrated in Fig. 5.9(a), the LES satisfactorily reproduces the axial evolution of the partial fuel density, the ensemble average generally lying within the uncertainty interval of the experiments (estimated to 20%). Qualitatively, the LES partly reproduces the low fuel density region between 5 and 15 mm from the nozzle. As described in Musculus and Pickett (2009) this low fuel density results from an entrainment wave created by the rapid closure of the injector needle, that

leads to an intensification of mixing in the near nozzle region. Quantitatively this phenomenon is underestimated by the present LES, possibly in relation to a blocking effect induced by the DITurBC cone. The axial fuel penetration is satisfactorily captured, although the LES typically exhibits a small fuel rich pocket at the head of the jet that is not apparent in the experimental mean fields. The radial profiles shown in Figs. 5.9(b) to 5.9(d) indicate that the opening angle of the jet observed experimentally is well reproduced by the LES. It should be noted that the experimental uncertainties strongly increase for low fuel concentrations found at the jet edges and close to the injector, so that a quantitative comparison with LES in these zones must be considered with care. Furthermore, albeit 15 LES realisations appear able to capture the global trends, they are probably insufficient to yield a well converged field as the one obtained from 50 experimental realisations.

5.1.5.2 Comparisons of instantaneous combustion predictions

Having assessed that the LES approach allowed a satisfactory prediction of the inert jet, the two proposed LES combustion models with their subgrid-scale closure variants were compared based on individual LES realisations to analyse their differences in predicting auto-ignition and combustion of the studied jet.

According to Mastorakos et al. (1997), auto-ignition of a turbulent diffusion flame occurs at a mixture fraction $Z = Z_{mr}$, with Z_{mr} the most reactive mixture fraction. As Z_{mr} is supposed independent of the turbulence, it can be determined with laminar diffusion flames. Fig. 5.10 presents the delay to reach a progress variable $c = 0.05$ for a laminar diffusion flame submitted to several strain rates in the conditions of the first heat release spots of the CFD computation. The Z_{mr} is found for slightly lean mixture fractions ($Z \approx 0.048$ with $Z_{st} = 0.062$) and is independent with strain rate. The auto-ignition conditions of the 3D computation are determined by Fig. 5.11 showing the mixture fraction, temperature and strain rate (common to all computations as heat release is still negligible), and Fig. 5.14 comparing the filtered progress variable reaction rate for the two models and their variants at combustion start around $t=250 \mu\text{s}$. All models predict first onsets of ignition in the peripheral part of the jet, in slightly lean regions ($Z \approx 0.05$) with low strain rates ($a \approx 50 \text{ s}^{-1}$) for $T_a \approx 900 \text{ K}$ and $T_f \approx 700 \text{ K}$. This observation is coherent with previous observations of Mastorakos et al. (1997) arguing that auto-ignition occurs for lowest values of the strain rate. The most reactive mixture fraction Z_{mr} for this configuration is located on lean mixture fractions ($Z = 0.05$) due to the beneficial effect of the higher temperatures at low mixture fractions. This result, close to the Z_{mr} of the laminar diffusion flames is in accordance with the definition of a Z_{mr} independent of turbulence and only determined by T_a and T_f (Mastorakos et al., 1997).

At this early instant, the propagation of combustion away from the initial ignition sites along the stoichiometric mixture fraction isoline predicted by THR and THR-PDF is much slower than for



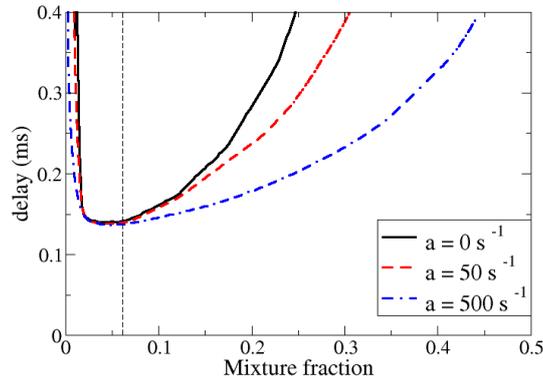


FIGURE 5.10 – Delay to reach $c = 0.05$ for approximated diffusion flame with $T_a = 900\text{K}$, $T_f = 700\text{K}$ and $p = 70\text{ bar}$ for 3 strain rates. The vertical dash line corresponds to stoichiometric mixture fraction.

the ADF and ADF-PCM models, which do indeed account for the subgrid-scale diffusion based on strained diffusion flames. As a result, the propagation of heat release and advancement away from the first auto-ignition spots is faster for ADF and ADF-PCM, along the stoichiometric line and orthogonal to it towards leaner and richer zones.

Instantaneous fields predicted by the two models and their variants are then compared at two instants : $t = 350\ \mu\text{s}$, corresponding to the instant combustion has propagated to the whole jet, and $t = 600\ \mu\text{s}$, corresponding to the final combustion phase after the end of injection. Figure 5.12 and 5.13 show the temperature at $t = 350\ \mu\text{s}$ and $t = 600\ \mu\text{s}$. Similarly, figures 5.15 and 5.16 display the reactions rates fields at $t = 350\ \mu\text{s}$ and $t = 600\ \mu\text{s}$.

According to Fig. 5.15 reaction rates predicted by THR and THR-PDF propagate much slower into leaner and richer regions than with ADF and ADF-PCM, as they do not account for subgrid-scale diffusion in mixture fraction space. The latter predict a much broader reaction zone, which has already reached the jet tip. A further difference becomes apparent between the THR and ADF models on one side, and the THR-PDF and ADF-PCM models on the other. For the latter, accounting for the effect of mixture fraction variance on combustion leads to a net reduction of the maximum values of progress reaction rates as observed on Figs. 5.6 and 5.7. As a result, the heat release rates predicted by THR and ADF reach higher values than for THR-PDF and ADF-PCM, and Fig. 5.12 shows that they thus yield much higher maximum temperature levels.

At $600\ \mu\text{s}$ (Fig. 5.13 and 5.16) combustion has propagated to the jet tip for all models. The faster burning predicted by ADF and THR leads to a spotty appearance of the reaction rates, as the remaining fuel is nearly completely consumed. ADF-PCM and THR-PDF exhibit smaller reaction rates in a broader spatial region. As a result, ADF and THR lead to higher maximum temperatures essentially found on the jet edges, while the temperature distribution is more homogeneous and exhibits lower maximum temperatures with the models using a β -PDF to take

mixture fraction fluctuations into account.



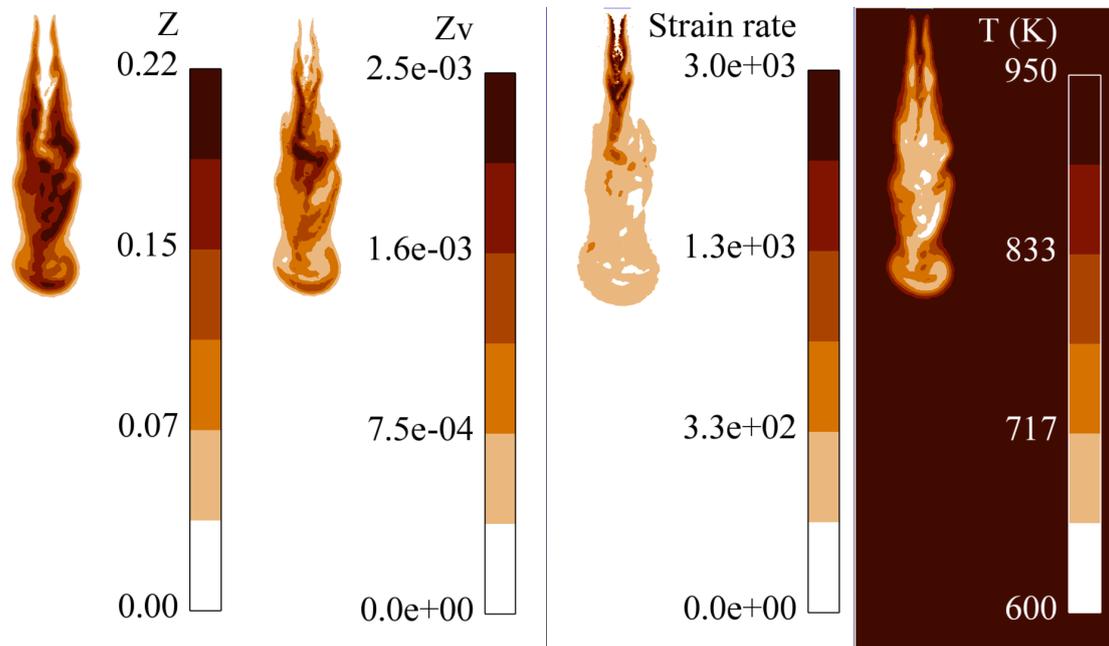


FIGURE 5.11 – Instantaneous fields of mixture fraction, mixture fraction variance, strain rate and temperature at $t = 250 \mu s$ predicted by ADF-PCM approach. It is to note that at this early time before injection, all models provide identical results.

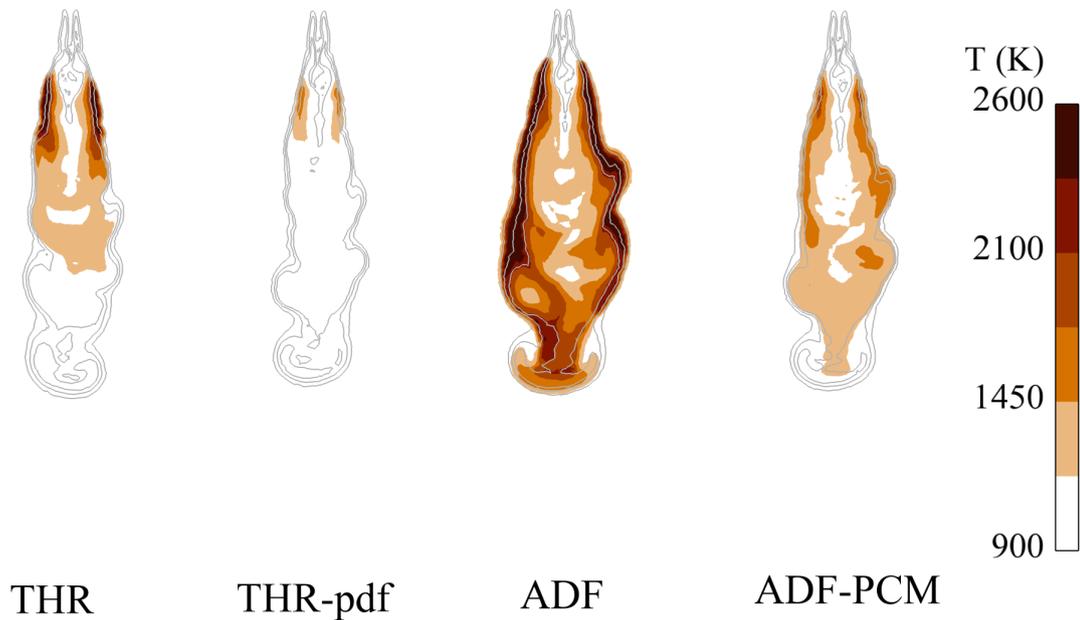


FIGURE 5.12 – Filtered temperature predicted by the two models and their variants at $t = 350 \mu s$. The lines are isolines of mixture fraction corresponding to equivalence ratios of respectively 0.5, 1 and 2.

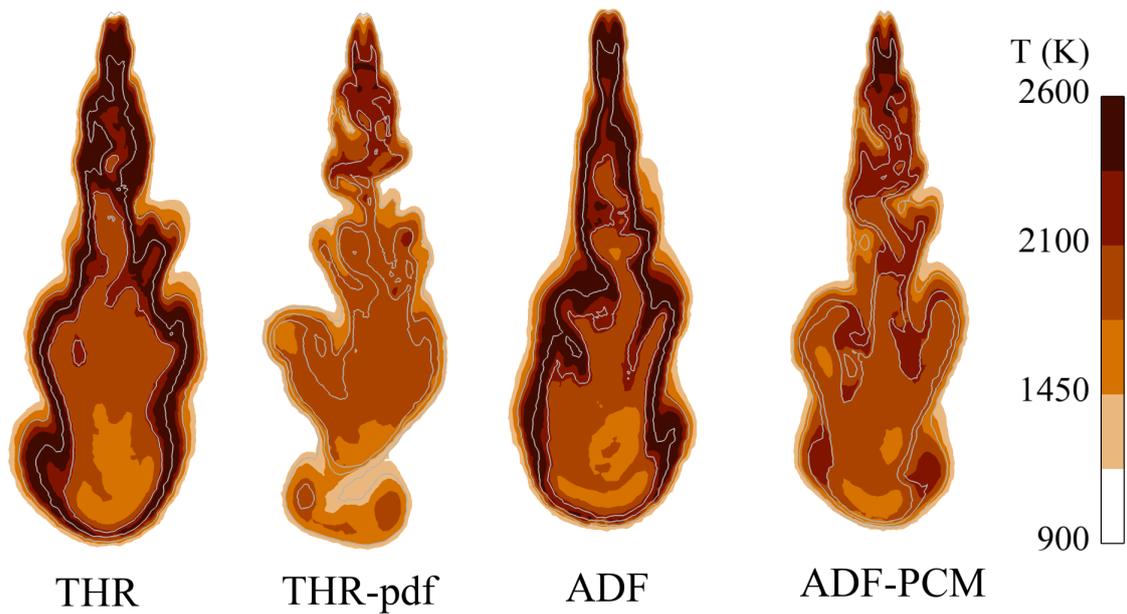


FIGURE 5.13 – Filtered temperature predicted by the two models and their variants at $t = 600 \mu s$. The lines are isolines of mixture fraction corresponding to equivalence ratios of respectively 0.5, 1 and 2.

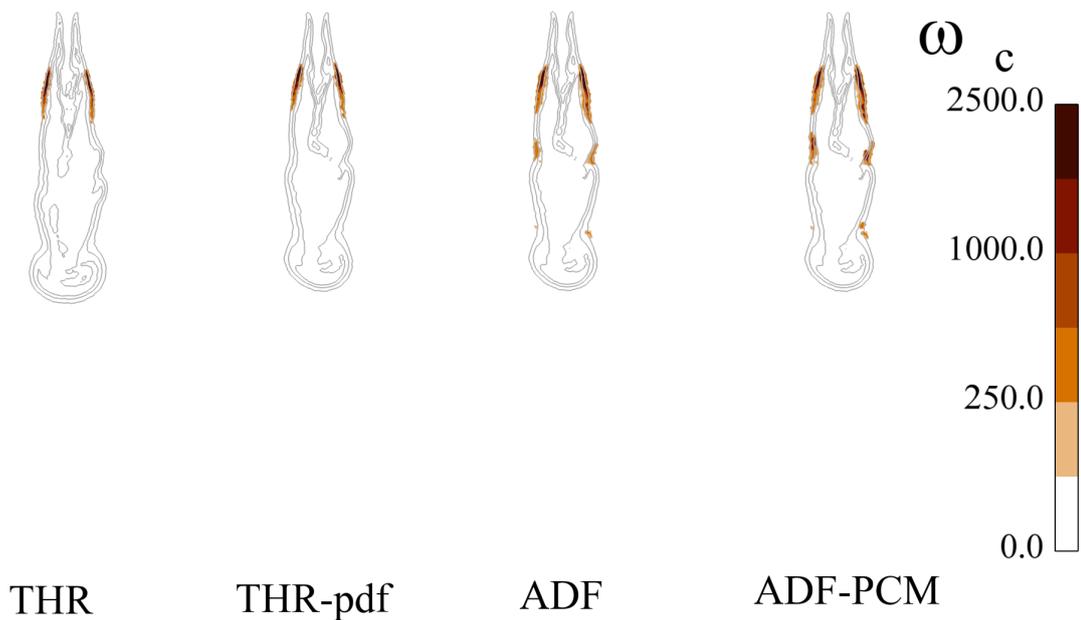


FIGURE 5.14 – Filtered progress variable reaction rates predicted by the two models and their variants at $t = 250 \mu s$. The lines are isolines of mixture fraction corresponding to equivalence ratios of respectively 0.5, 1 and 2.



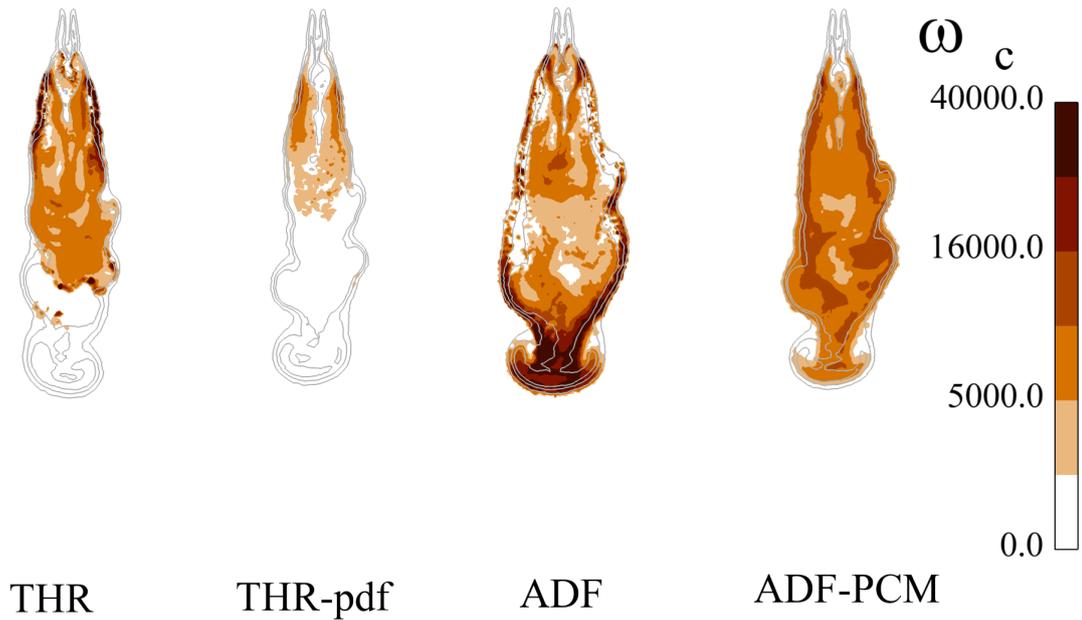


FIGURE 5.15 – Filtered progress variable reaction rates predicted by the two models and their variants at $t = 350 \mu s$. The lines are isolines of mixture fraction corresponding to equivalence ratios of respectively 0.5, 1 and 2.

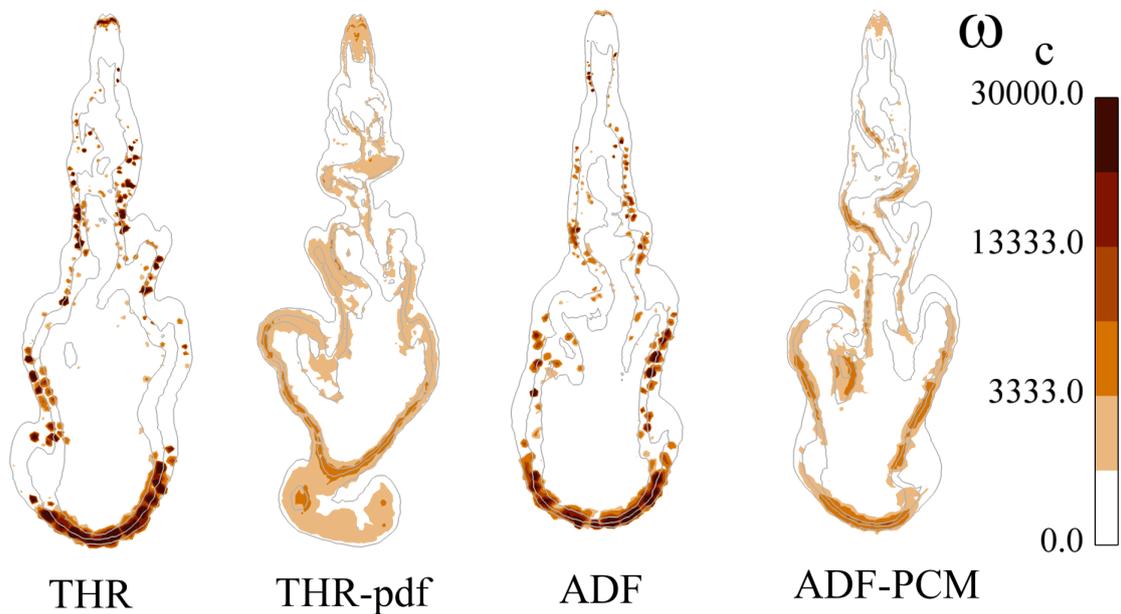


FIGURE 5.16 – Filtered progress variable reaction rates predicted by the two models and their variants at $t = 600 \mu s$. The lines are isolines of mixture fraction corresponding to equivalence ratios of respectively 0.5, 1 and 2.

5.1.5.3 Auto-ignition delays and heat release comparisons

The three key parameters of interest for predicting Diesel sprays are the auto-ignition delay, the lift-off length and the total heat release rate. The present spray is representative of a pilot injection, and the timespan during which the injection rate is constant is too short to be able to reach a stabilized lift-off length. The basis for comparing the LES predictions of the two other quantities with experimental findings is the time recording of the cell pressure. To compare experimental data with LES predictions, it should be remembered that the experimental cell is not perfectly adiabatic, while this assumption is used in the LES. The experimental pressure signal was thus post-processed to correct heat losses and estimate the pressure under adiabatic conditions in order to be comparable to LES findings. Heat losses are considered constant and evaluated using the temporal pressure gradient before injection (Idicheria and Pickett, 2007a).

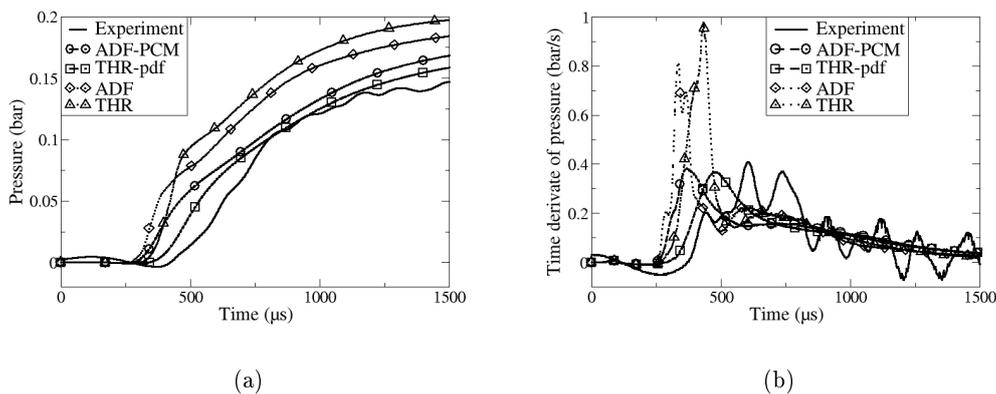


FIGURE 5.17 – Time evolutions of mean cell pressure (a) and its time derivative (b) : Comparisons of instantaneous adiabatic LES predictions for one individual realisation with the ensemble-averaged mean experimental signal corrected for non-adiabaticity.

Figures 5.17(a) and 5.17(b) compare instantaneous time evolutions of cell pressure and its time derivative predicted by individual LES realisations with the experimental ensemble-averaged signal corrected for non-adiabaticity. Defining early auto-ignition as the time at which the pressure derivative exhibits non zero values, the predictions by the THR, ADF and ADF-PCM models are very similar, while THR-PDF yields a longer delay of about 50 μs . The experimental signal exhibits slope variations at the start of auto-ignition that do not allow a quantitative comparison with the LES predictions. Qualitatively, Fig. 5.17(b) shows that the slope of pressure rise predicted by the THR and ADF models largely exceed those of THR-PDF and ADF-PCM, and seems unrealistically high as compared to the experimental values (despite of their uncertainties). This confirms the previous observation that neglecting the variance of mixture fraction leads to a too fast initial combustion after auto-ignition. This is even more pronounced for THR, which neglects all strain and subgrid-scale mixing effects. The ADF-PCM and THR-PDF models yield more realistic pressure slopes in the initial auto-ignition phases, with a slight advantage for THR-



PDF. At later stages of combustion after $t=500 \mu\text{s}$, all models predict a very similar pressure rise rate, of the same order of magnitude than the experimental observations. As a result of a fast initial burning after auto-ignition, the pressure levels at later stages of combustion (after $=750 \mu\text{s}$) predicted by ADF and THR largely exceed the experimental findings. The predictions by ADF-PCM and THR-PDF are quite comparable, although the combustion speed predicted by the latter appears to match more closely the experimental signal. It can be concluded from these findings that neglecting mixture fraction variance on the present mesh resolution yields unrealistically high combustion rates during the propagation of combustion from the first auto-ignition spots. Accounting for these effects allows more realistic predictions as confirmed by the ADF-PCM and THR-PDF models. These qualitative findings will of course have to be verified in future work relying on more quantitative experimental data.

5.1.5.4 Combustion variability

Having compared the predictions in terms of auto-ignition delay and rate of propagation of combustion to the whole jet based on individual LES realisations, the purpose of this last Section is to assess the variability of the auto-ignition and combustion phenomena based on an ensemble averaged analysis of 15 LES realisations with different random perturbations to mimic the natural variability of the outflow conditions (Sect. 5.1.4.2). Because of limitations in terms of CPU time, this analysis has only been performed with the ADF-PCM model.

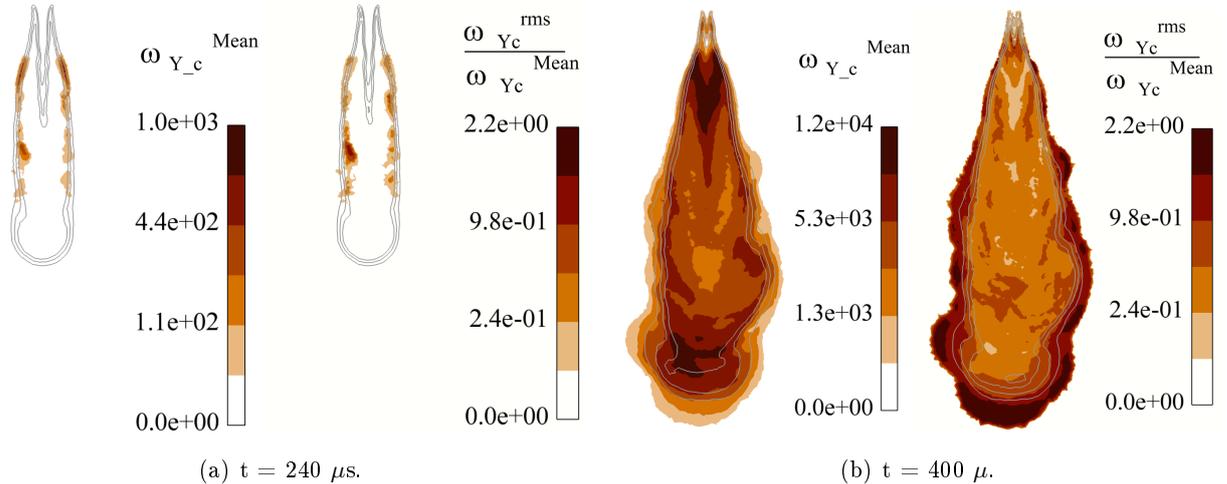


FIGURE 5.18 – Mean and RMS (normalized by the mean) fields of progress variable reaction rate from 15 realisations with ADF-PCM : (a) $t = 240 \mu\text{s}$, (b) $t = 400 \mu\text{s}$. Isolines correspond to mean equivalence ratios of 0.5, 1 and 2.

Figure 5.18 shows the mean and RMS fields of the filtered progress reaction rate at two instants obtained from 15 LES realisations with ADF-PCM. During the early auto-ignition phase at $t=240 \mu\text{s}$, the average auto-ignition and propagation corresponds to the one described above for

an individual realisation : first auto-ignition appears close to the nozzle, in a slightly lean zone, and propagates downstream along the stoichiometric line. The variability predicted by LES is small close to the injector, leading to a very repeatable auto-ignition location (and delay, see below). A higher variability of progress reaction rate becomes apparent further downstream on the edges of the jet, which is characterised by a high intermittency as turbulence is fully developed downstream of the nozzle. This also holds during the combustion propagation phase at $t = 400 \mu\text{s}$, where large RMS values are found on the jet edges and tip, while the levels of variability are much lower inside the jet. As a consequence the RMS temperature fluctuations predicted at $400 \mu\text{s}$ are strong on the jet edges and tip as shown in Fig. 5.19. The lateral and radial penetration fluctuations due to turbulence are the reason of the important variability of the combustion on the edges of the spray.

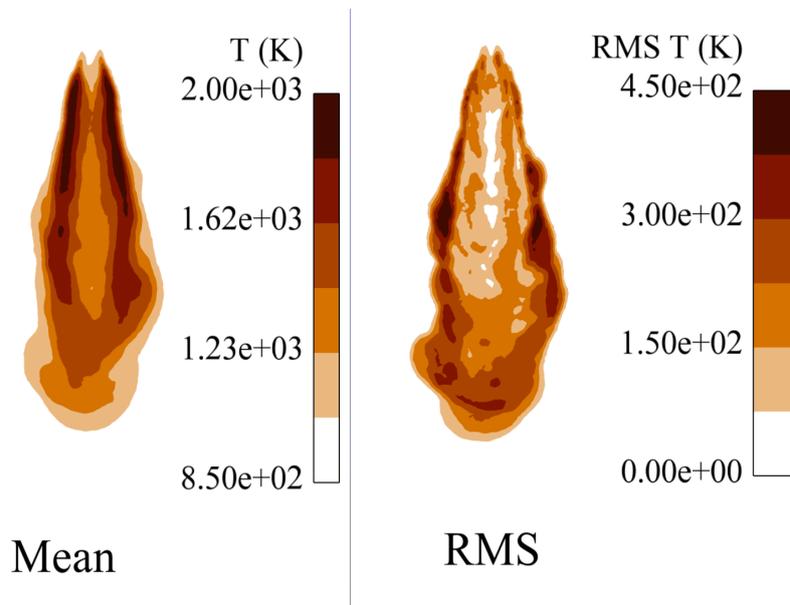


FIGURE 5.19 – Ensemble averaged temperature from 15 realisations with ADF-PCM at $t = 400 \mu\text{s}$. Left : mean, right : RMS.

Figure 5.20 shows the time evolution of the mean cell pressure and its time derivative for the fifteen ADF-PCM realisations. The predicted auto-ignition delay (corresponding to the instant at which the pressure rise starts) exhibits negligible fluctuations, confirming the observations made based on the spatial fields of progress reaction rates at $t = 250 \mu\text{s}$. During the propagation phase between $t = 250 \mu\text{s}$ and $t = 400 \mu\text{s}$, the variability increases, as the interactions between the turbulent intermittent flow and combustion chemistry becomes more important, and reaches non-negligible values during the final combustion phase after $t = 450 \mu\text{s}$. At $t = 800 \mu\text{s}$, the variability in terms of pressure time derivative (a measure of heat release) reaches 10%.



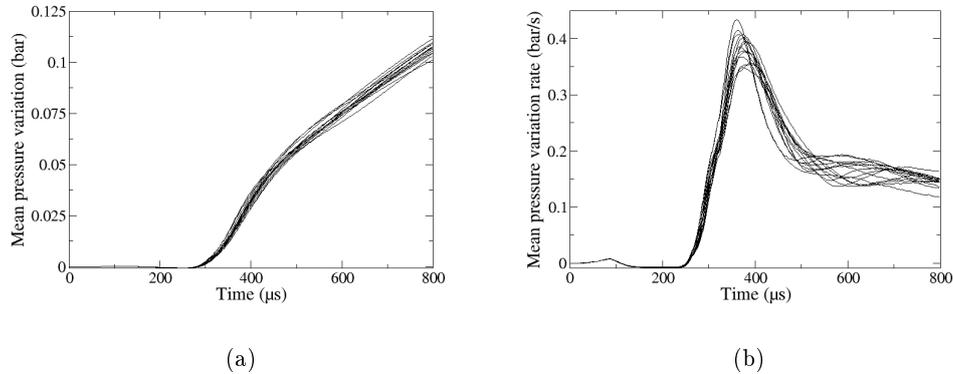


FIGURE 5.20 – Comparisons of instantaneous LES predictions for fifteen individual realisation with ADF-PCM : time evolutions of the mean cell pressure (a) and time derivative of the mean cell pressure (b).

Conclusions

Two LES approaches for auto-ignition and non-premixed spray combustion have been presented, each separated in two variants. The common principle was to account for complex chemistry effects via the off-line generation of chemistry look-up tables based on auto-igniting homogeneous reactors. The advantage of this approach is to use detailed chemical schemes (in the present case a mechanism including 3684 reactions and 662 species (Wang et al., 2010)), while keeping the related computational overhead in the CFD code very low. The THR approach assumes the local structure of the reaction zone to be that of an auto-igniting homogeneous reactor, while the ADF approach identifies it to a strained auto-igniting diffusion flame. Each of these approaches was formulated in two variants, depending on the shape of the presumed PDF for subgrid-scale mixture fraction used to estimate filtered species reaction rates. The THR and ADF models assume a Dirac function centered on the mean mixture fraction (thus neglecting subgrid-scale mixture fraction fluctuations), while the THR-PDF and ADF-PCM models assume a β -PDF. These models have been integrated into the LES code AVBP and were applied to the LES of injection and combustion of a liquid spray in a constant volume vessel, representative of a pilot-type, short duration Diesel injection, for which experimental results are available (Bruneaux, 2008).

Comparing LES predictions obtained with a mesoscopic Eulerian formalism to simulate the liquid phase flow, combined with the DITurBC model to avoid simulating the dense part of the spray close to the injector, showed a satisfactory reproduction of experimental ensemble averaged mean fuel partial density profiles, with an adequate prediction of the spray tip penetration and opening angle, while the air entrainment wave generated by the injector closure was found to be under-predicted by the LES.

An assessment of the LES quality based on Pope's criterion showed that although the mesh was refined down to $80 \mu m$ close to the injector, an important part of the gas phase turbulence could only be resolved in the downstream part and at late instants, when gradients generated by the high speed liquid jet become smaller. It was also discussed that Pope's criterion is only a necessary requisite for assessing LES quality, but that much more efforts are needed to ascertain these conclusions.

Comparisons of LES predictions obtained with the different models, and their comparison with experimental findings, led to the following main conclusions :

- The spatial position of first auto-ignition sites predicted by all models was very similar, at locations in the upper part of the gas jet and slightly on the lean side, where conditions in terms of scalar dissipation, temperature and fuel levels are favourable ;
- The auto-ignition delays predicted by all models were identical, except for THR-PDF, which predicted a slightly longer delay. However, the available experimental data did not allow discriminating quantitatively these predictions with sufficient accuracy ;
- The ADF and ADF-PCM models predicted an initially faster propagation of combustion away from the first auto-ignition sites, as they account for diffusion in Z -space. The THR or THR-PDF models predicted a slower propagation and thinner reaction zones ;
- At later instants, when combustion has propagated to the entire jet, the fact that THR and ADF neglect subgrid-scale variance of mixture fraction leads to a much faster heat release rate than with the other models, yielding higher local temperatures at the edges of the jet. Combustion predicted by ADF-PCM and THR-PDF was noticeably slower, and closer to experimental findings than the predictions by the other models. Both yielded more homogeneous temperature fields in the jet, with lower local maximum levels.

Finally, the variability of the spray combustion was analysed based on ensemble averaged fields obtained from 15 realisations with the ADF-PCM model, highlighting that for the present pilot-type jet the variability in terms of auto-ignition delay was negligible, while it reaches values about 10 % in terms of heat release rate in later stages of combustion, due to the variability of the large scale flow from realisation to realisation.

To summarize, the THR-PDF and ADF-PCM models yield qualitatively more sound predictions for this pilot-type spray than THR or ADF, which neglect subgrid-scale stratification. However, a fully quantitative validation was not possible given the available experimental data for this spray. In particular the short spray duration did not allow characterising lift-off lengths that are a key feature of Diesel-type jets generated by longer, main injections. This will be the subject of future work.



Acknowledgements

This work was granted access to the HPC resources of CCRT under the allocation 2012-026139 made by GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif).

5.2 Résultats complémentaires

Dans cette section, les résultats complémentaires concernant les dépendances du profil de carburant au taux d'introduction et au maillage pour la configuration non-réactive sont présentés. Ces travaux ont été effectués conjointement avec A. Robert et ont donné lieu à une publication commune (Robert et al., 2012).

5.2.1 Influence du taux d'introduction

Comme nous l'avons vu dans la Section 5.1.4.1, le taux d'introduction expérimental présente de fortes fluctuations (Fig. 5.4) induisant des valeurs négatives non physiques. Celles-ci sont dues à la réponse oscillatoire du capteur, composé schématiquement d'un ressort surmonté d'une plaque sur laquelle impacte le spray. Ce système peut être considéré comme un système oscillant amorti. A partir de la figure 5.4 nous pouvons estimer que la période propre du capteur est d'environ 0,2 ms. Les temps caractéristiques de fermeture de l'injecteur étant plutôt de l'ordre de quelques dizaines de μs , le capteur ne possède pas un temps de réponse suffisamment court pour caractériser le taux d'introduction lors de la phase de coupure. Nous avons choisi de modéliser le taux d'introduction en trois phases : une phase de levée de l'aiguille, une phase stabilisée pour laquelle le taux d'introduction est constant et une phase de fermeture. Nous nous intéressons ici plus particulièrement à la phase de fermeture et à son influence sur les profils axiaux de carburant.

La figure 5.21 présente les différents profils de taux d'introduction testés pour la phase de coupure.

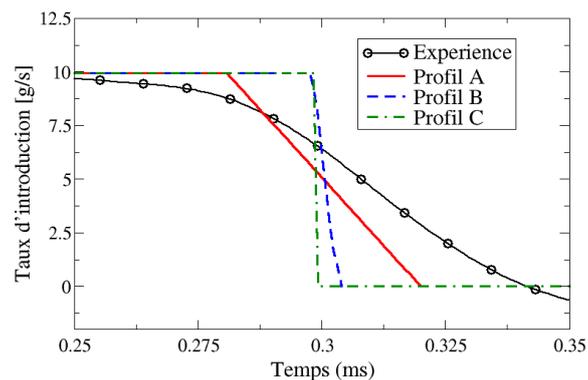


FIGURE 5.21 – Comparaison des différents taux d'introduction testés avec le taux d'introduction expérimental.

Le profil A présente une fermeture linéaire assez lente, relativement proche de la vitesse de fermeture prédite par le capteur, s'étalant sur 39 μs . Le profil B représente quant à lui une fermeture beaucoup plus brusque de l'injecteur, en 7 μs . Enfin le profil C considère une coupure instantanée. De façon à conserver la masse globale introduite, la coupure des profils B et C est



retardée de $15 \mu s$. Les profils axiaux moyens de la fraction massique de carburant résultant de ces trois taux d'introduction sont comparés avec les résultats expérimentaux sur la figure 5.22. Ils ont chacun été obtenus à partir de 15 réalisations. La même opération pour les profils expérimentaux en a nécessité 50. Ce choix est discuté par [Robert et al. \(2012\)](#).

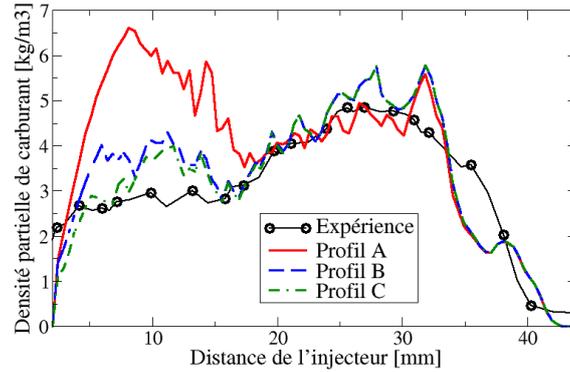


FIGURE 5.22 – Évolution des profils axiaux moyens de fraction massique de carburant pour les différents taux d'introduction $500 \mu s$ après le début de l'injection.

Le profil de la fraction massique expérimentale de carburant présente une première zone, comprise entre 5 et 20 mm, pour laquelle la densité partielle de carburant reste relativement constante. Celle-ci est suivie d'une poche de carburant au bout du jet. Cette répartition particulière du carburant le long de l'axe est caractéristique d'une coupure rapide de l'injection générant un phénomène d'entraînement ([Musculus and Pickett, 2009](#)). Ce phénomène intensifie le mélange du carburant évaporé avec l'air près de l'injecteur, et y conduit à des niveaux de fraction massique de carburant plus faibles, comme observé pour le profil expérimental de la figure 5.22. Ce phénomène a été étudié par [Hu et al. \(2010a\)](#) à partir de LES de sprays non-réactifs. Ils ont montré que lors de la coupure de l'injection, l'augmentation du mélange à proximité de l'injecteur était liée à la création d'importantes structures turbulentes dans cette zone. Ils ont émis l'hypothèse que ces structures turbulentes étaient le résultat de la déstabilisation de la couche de cisaillement par la décélération du jet. Dans cette zone de mélange, de fortes différences peuvent être observées entre les trois profils testés, le mélange étant entraîné par la coupure de l'injection. Ainsi, plus la pente du profil du taux d'introduction à la fermeture est forte et plus la fraction massique de carburant est pauvre dans cette zone. Le profil le moins raide (A) conduit à une forte surestimation de la concentration de carburant à proximité de l'injecteur. Les profils B et C prédisent quant à eux des concentrations beaucoup plus proches de l'expérience, avec un léger avantage pour le profil C. Les différences entre les profils de carburant obtenus par les simulations se réduisent à mesure que l'on s'éloigne de l'injecteur. Finalement, les trois profils conduisent à une bonne reproduction de la pénétration gazeuse ainsi que du profil expérimental à partir de 20 mm de l'injecteur. Dans cette zone éloignée de l'injecteur et donc peu sensible à la phase de coupure de l'injection, seules de faibles différences sont observées entre les trois profils testés.

Nous voyons ici l'importance de l'effet d'entraînement sur les profils axiaux. Plus la phase de

coupure de l'injection est rapide et plus celui-ci est important, augmentant le mélange à proximité de l'injecteur. Cet effet d'entraînement est difficilement reproduit. Il en résulte une surestimation systématique de la densité partielle du carburant à proximité de l'injecteur (typiquement entre 10 et 15 mm), probablement à cause du cône introduit par le modèle DITurBC (Martinez et al., 2010) qui limite l'entraînement du carburant par les gaz environnants (Robert et al., 2012) à proximité de l'injecteur. Les incertitudes liées au taux d'introduction expérimental ne permettent pas de déterminer de façon précise la vitesse de fermeture. Néanmoins, la fermeture instantanée de l'injecteur modélisée par le profil C n'étant pas physique, le profil B a été retenu dans les calculs présentés même si le temps de fermeture réel de l'injecteur est probablement plus long.

5.2.2 Dépendance au maillage

La simulation non-réactive du spray a été réalisée pour trois maillages différents dont les caractéristiques sont présentées dans le tableau 5.3. Les tailles de maille caractéristiques pour les trois maillages sont toutes égales à 80 μm à la sortie de l'injecteur et varient entre 300 et 1200 μm à la fin de la zone raffinée située à 54 mm de l'injecteur. Les profils expérimentaux moyennés sont basés sur 50 réalisations. Les résultats obtenus par le calcul ont nécessité 30 réalisations (Robert et al., 2012).

	Maillage A	Maillage B (Fig. 5.5)	Maillage C
Dimension caractéristique du maillage au niveau de l'injecteur	80 μm	80 μm	80 μm
Dimension caractéristique du maillage à l'extrémité de la zone raffinée	1200 μm	800 μm	300 μm
Nombre de cellules ($\times 10^6$)	0,5	1,8	6,75

TABLE 5.3 – Présentation des différents maillages testés

Les figures 5.23 et 5.24 présentent respectivement l'évolution des profils axiaux et radiaux à 10, 20 et 30 mm de l'injecteur pour l'expérience et les trois maillages. Le maillage A présente des résultats très éloignés de l'expérience. Il surestime fortement la densité partielle de carburant entre 10 et 20 millimètres de l'injecteur. De plus, il prédit une ouverture de jet plus faible que celle obtenue lors de l'expérience. Il semble donc que ce maillage ne soit pas assez raffiné pour décrire la dynamique globale du spray et plus particulièrement l'effet d'entraînement. Les résultats obtenus par les maillages B et C sont beaucoup plus proches de l'expérience et assez similaires, ce qui semble indiquer une convergence du maillage. Ils prédisent tous deux très bien l'ouverture du jet et se montrent capables de reproduire correctement les profils axiaux de carburant. Leurs différences sont localisées majoritairement entre 10 à 20 mm. A cette distance le maillage B prédit une densité partielle de carburant plus importante que le maillage C qui tend à la sous-estimer.



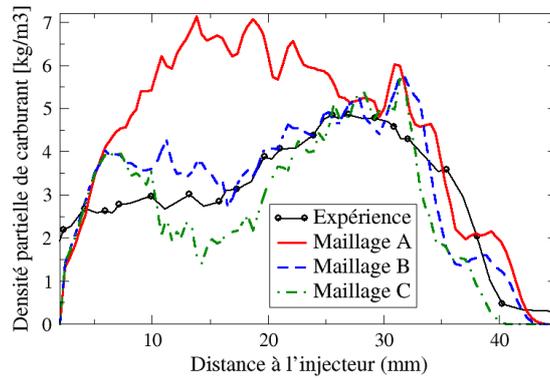


FIGURE 5.23 – Évolution du profil axial de la fraction massique de carburant pour les trois maillages présentés dans la Table 5.3 à $500 \mu\text{s}$ après le début de l'injection.

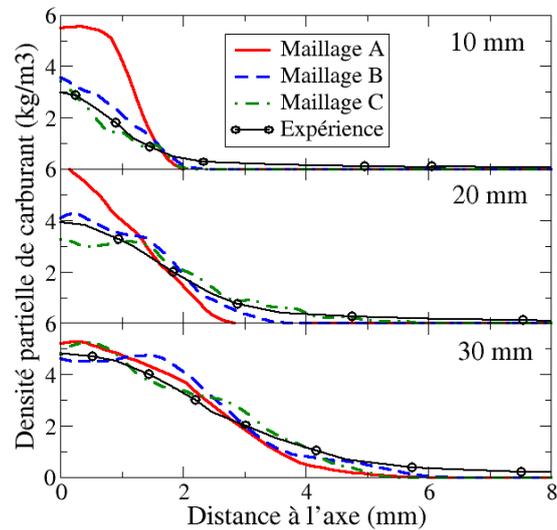


FIGURE 5.24 – Évolution des profils radiaux de la fraction massique carburant à 10, 20 et 30 mm de l'injecteur pour les trois maillages présentés dans la Table 5.3 à $500 \mu\text{s}$ après le début de l'injection.

Nous voyons ici que le maillage le plus raffiné ne permet pas nécessairement d'obtenir les meilleurs résultats. L'une des explications possibles réside dans l'utilisation du modèle DITurBC, et plus particulièrement du cône qu'il introduit. Celui-ci limite les phénomènes d'entraînement à proximité de l'injecteur. Le profil de coupure du taux d'introduction choisi dans la section précédente est probablement plus raide que celui du profil expérimental. Il présente néanmoins les meilleurs résultats, probablement parce qu'il permet de compenser l'effet du cône DITurBC sur ce maillage. En raffinant le maillage, ces effets ne se compensent plus nécessairement et peuvent aboutir à une dégradation des résultats. L'utilisation du modèle DITurBC pour des configurations d'injections courtes nécessiterait donc des améliorations pour que la prédiction de l'entraînement soit indépendante du maillage. Néanmoins cette étude sort du cadre de ces travaux. De plus, l'effet du phénomène d'entraînement sur la combustion reste *a priori* marginal, celle-ci s'initiant bien

avant la coupure de l'injection. Le but premier de cette étude étant la validation des modèles de combustion, nous avons donc choisi d'utiliser, pour les calculs de ce chapitre, le taux d'introduction B sur le maillage B. Ceux-ci permettent une bonne prédiction de l'aérodynamique du spray.



Chapitre 6

Simulation du spray H

Ce chapitre reprend l'article "*Large-Eddy Simulation of Diesel Spray Combustion with Exhaust Gas Recirculation*" soumis au journal *Oil & Gas Science and Technology* en Août 2012. Il présente l'application du modèle ADF-PCM au *Spray H* (Siebers and Higgins, 2001) étudié expérimentalement par les laboratoires Sandia dans le cadre de l'ECN (Engine Combustion network). Cette expérience consiste en l'injection à haute pression d'un carburant liquide dans une enceinte portée à des conditions thermodynamiques proches de celles d'un moteur Diesel. Cette expérience est donc sensiblement similaire à celle présentée dans le chapitre précédent. Elle présente néanmoins des différences avec l'expérience précédente qui justifient de son intérêt. Tout d'abord, l'expérience précédente proposait des injections pilotes utilisées dans des stratégies d'injections multiples. L'expérience du Spray H utilise quant à elle un taux d'introduction long, avec une phase à taux d'introduction constant. Cela permet de définir une hauteur d'accrochage de la flamme (LOL), ce qui n'était pas possible dans le cas précédent. De plus, un capteur dédié est utilisé pour les mesures de variations de pression, ce qui permet d'améliorer fortement la précision des courbes de pression et de dégagement de chaleur qui en sont déduites. Enfin, le spray H a été réalisé pour différentes conditions initiales, et notamment différents taux de recirculation de gaz brûlés. Il nous a permis de vérifier les capacités de l'approche ADF-PCM à reproduire l'influence des EGR sur la combustion. Cet article est suivi par des résultats complémentaires concernant l'évolution temporelle de la hauteur de lift-off (Sect. 6.2.1), le choix du maillage (Sect. 6.2.2), l'influence du schéma cinétique (Sect. 6.2.3) et une comparaison des prédictions des approches ADF-PCM, THR-PDF et THR (Sect. 6.2.4).



6.1 Large-Eddy Simulation of Diesel Spray Combustion with Exhaust Gas Recirculation

Abstract

A Large-Eddy Simulation (LES) study of the transient combustion in the Spray H experiment investigated in the frame of the Engine Combustion Network (ECN) is presented. Combustion is modelled using a LES formulation of the ADF-PCM approach, the principle of which is to tabulate approximated diffusion flames based on the flamelet equation to account for complex chemical effects. The liquid phase is resolved with an Eulerian mesoscopic approach coupled with the DITurBC model for the injection. The structure of the combustion resulting from the n-heptane liquid fuel jet is investigated and compared to the literature. A very good reproduction of experimental findings by the presented LES approach is reported for small EGR rates. Albeit the qualitative effect of increasing the EGR rate is captured, the quantitative quality of the LES predictions deteriorates with increasing EGR rate. One possible explanation for this poor reproduction of EGR effects might be related to the fact that the used semi-detailed scheme was not validated for high EGR rates.

6.1.1 Introduction

A detailed understanding of Diesel engine combustion is critical to improve engine efficiency while reducing pollutant emissions. To study Diesel engine combustion, constant volume chambers are often used (Siebers and Higgins, 2001; Idicheria and Pickett, 2007a). They allow studying transient liquid jet combustion under conditions representative of Diesel engines, without the complexity inherent to such devices.

The simulation of constant volume chambers is still a challenge requiring to model spray formation, liquid evaporation, auto-ignition and flame stabilisation. Three major parameters are used to characterise the Diesel spray combustion : the heat release rate (HRR), the auto-igniting delay and the lift-off length (LOL) (Idicheria and Pickett, 2007a; Venugopal and Abraham, 2007; Novella et al., 2010).

An important literature already exists concerning Reynolds average Navier-Stokes (RANS) simulation of the Spray H experiment. Gopalakrishnan and Abrahams (2002) performed Representative Interactive Flamelet (RIF) (Pitsch et al., 1996) computations comparing heat release rate and auto-ignition localisation. Tap and Veynante (2004) developed a generalised surface density modelling approach assessed on lift-off length for several injector diameters and ambient densities. Lift-off length predictions based on the strain rate have been performed by Venugopal and Abraham (2007) for several chamber densities, temperatures, and oxygen concentrations. Azimov et al. (2010) used the ECFM3Z (3-Zones Extended Coherent Flame Model) (Colin and Benke-

nida, 2004) combustion model to predict flame LOL and HRR. Novella et al. (2010) compared different chemical schemes assuming homogeneous combustion at the filter size. The chemistry was assessed on LOL, auto-ignition delay and HRR for different temperatures and oxygen concentrations.

Contrary to RANS, LES takes into account local, instantaneous, spatially filtered flow phenomena, resolving the largest flow scales and modelling only the effects of the smallest ones. It thus appears as having a good potential for addressing unsteady and highly stratified flow found in Diesel combustion. While the literature proposes several studies of LES of Diesel engines (Hu et al., 2008; Seo et al., 2010), very few has been published to date on LES of liquid spray combustion in constant volume chambers. Bekdemir et al. (2012) used a FGM (Flamelet Generated Manifold) model (Bekdemir et al., 2010) adapted to LES to predict LOL and auto-ignition delays and compare with experimental findings for Spray H.

In the present paper, the ADF-PCM (Approximated Diffusion Flame - Presumed Conditional Moment) turbulent combustion model initially developed for partially premixed and non-premixed combustion in the RANS context by Michel et al. (2008, 2009b,a) is adapted to LES. It is combined with an Eulerian mesoscopic formalism describing the liquid jet and applied to the LES of the Spray H (Siebers et al., 2002; Pickett et al., 2005), experimentally studied by Sandia in the context of ECN (2012). It proposes a wide range of parametric variations and especially of EGR rates (Exhaust Gas Recirculation).

Section 6.1.2 presents the ADF-PCM model and its integration to the AVBP LES solver (Moureau et al., 2005). Section 6.1.4 then describes the numerical set-up and the different cases investigated. Finally Section 6.1.5 compares the obtained results with experimental findings with emphasis on the reproduction of the impact of EGR rate on combustion characteristics.

6.1.2 The ADF-PCM model

The ADF-PCM model (Michel et al., 2008, 2009b,a) tabulates auto-igniting approximated diffusion flames. These flames possess the advantage to be computed in a very short time, even for detailed chemical schemes. Indeed, unlike the computation of laminar diffusion flames which requires the resolution of the flamelet equation (Peters, 1985) for each species of the chemical scheme, the ADF approach resolves the transport equation only for the progress variable and extracts the chemical source term of this equation from a homogeneous reactor (HR) look-up table.



6.1.2.1 Approximated diffusion flame

The ADF approach consists in resolving the flamelet equation (Peters, 1985) for a progress variable Y_c :

$$\frac{\partial Y_c^{flam}}{\partial t} = \chi \frac{\partial^2 Y_c^{flam}}{\partial Z^2} + \dot{\omega}_{Y_c^{flam}} \quad (6.1)$$

where Y_c^{flam} indicates the progress variable transported by the flamelet equation and Z denotes the mixture fraction. The progress variable Y_c is defined as proposed by Fiorina et al. (2003) :

$$Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2} \quad (6.2)$$

The scalar dissipation rate χ is defined as :

$$\chi = D \left| \frac{\partial Z}{\partial x} \right|^2 \quad (6.3)$$

with D the mass diffusion coefficient. This quantity measures the rate of mixing and can be expressed, considering a counterflow diffusion flame with constant density, as a function of the mixture fraction Z and the strain rate a (Peters, 2000) :

$$\chi(Z, a) = \frac{a}{2\pi} \exp\left(-2 [\operatorname{erf}^{-1}(1 - 2Z)]^2\right) = aF(Z) \quad (6.4)$$

with erf^{-1} the inverse error function. The source term $\dot{\omega}_{Y_c^{flam}}$ is extracted from a previously built look-up table based on homogeneous reactors (HR) at constant pressure. Each HR corresponds to different initial temperatures T_u and mixture fractions Z . In the present case, the pressure is set to the experimental value of 42.25 bar. The set of initial conditions is chosen in order to map all the conditions that can be encountered during the simulation. This look-up table stores the species mass fraction Y_i and the reaction rate $\dot{\omega}_{Y_c}$ as functions of discrete values of Z , T_u and c , the normalized progress variable defined as :

$$c = \frac{Y_c}{Y_c^{eq}} \quad (6.5)$$

where the eq superscript denotes the thermodynamical equilibrium at constant pressure and enthalpy. The reaction rate of the flamelet (Eq. 6.1) is extracted from the HR look-up table following :

$$\dot{\omega}_{Y_c^{flam}} = \dot{\omega}_{Y_c}^{HR}\left(c^{flam}, Z, T_u(Z)\right) \quad (6.6)$$

with c^{flam} the normalized progress variable reconstructed with Y_c^{flam} using Eq. (6.5) and with $T_u(Z)$ the fresh gas temperature stratification considered as a linear function of the mixture

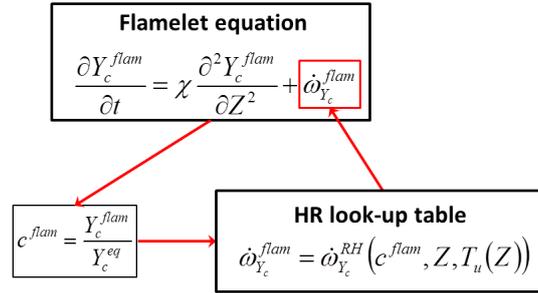


FIGURE 6.1 – Scheme of the ADF approach. The flamelet equation is resolved for Y_c^{flam} and the source term of this equation is extracted from the HR look-up table.

fraction for the approximated diffusion flame. Figure 6.1 presents a schematic view of the ADF approach.

Equation (6.1) is solved for different values of the strain rate a and the temperature stratification $T_u(Z)$. This allows building an intermediate ADF look-up table containing the species mass fractions extracted from the HR look-up table with the progress variable from the flamelet equation :

$$Y_i^{ADF}(t, Z, T_u(Z), a) = Y_i^{HR}(c^{flam}, Z, T_u(Z)) \quad (6.7)$$

This look-up table is completed by the flamelet progress variable variation rate following :

$$\dot{\omega}_{Y_c}^{ADF}(t, Z, T_u(Z), a) = \frac{\partial Y_c^{flam}}{\partial t}(c^{flam}, Z, T_u(Z)) \quad (6.8)$$

The semi-detailed chemical scheme of [Seiser et al. \(2000\)](#) containing 1540 reactions among 160 species is chosen for the HR computation. It has been especially validated on counterflow diffusion flame configurations at 1 bar and on ignition delays up to 100 bars. This mechanism has been used in prior studies of the spray H experiment ([Venugopal and Abraham, 2007](#); [Gopalakrishnan and Abrahams, 2002](#)) and is recommended by the ECN group.

6.1.2.2 The ADF-PCM look-up table

In order to take the subgrid-scale mixture stratification into account, the species mass fractions and reaction rates of the ADF look-up table are finally integrated using a presumed probability density function (PDF) which is assumed to be a β function. It is parametrised by the local mixture fraction Z , the filtered mixture fraction \tilde{Z} and its segregation factor S_z . This PDF is denoted as $P(Z)$ for the sake of clarity. It results in the ADF-PCM look-up table containing all the species transported in the CFD code, as well as the reaction rate of the filtered progress variable :

$$\tilde{Y}_i^{ADF-PCM}(t, \tilde{Z}, S_z, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, a) = \int_{Z=0}^{Z_s} Y_i^{ADF}(t, Z, \tilde{T}_u(Z), a) \tilde{P}(Z) dZ \quad (6.9)$$



$$\tilde{\omega}_{Y_c}^{ADF-PCM} \left(t, \tilde{Z}, S_z, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, a \right) = \int_{Z=0}^{Z_s} \tilde{\omega}_{Y_c}^{ADF} (t, Z, \tilde{T}_u(Z), a) \tilde{P}(Z) dZ \quad (6.10)$$

As the temperature stratification $\tilde{T}_u(Z)$ of the flamelet is considered linear, it is characterised by only two temperatures : the filtered air temperature $T_a(Z = 0)$ and the fuel temperature $T_f(Z = Z_s)$. Their filtered values are transported in the CFD code (Sect. 6.1.3.3) and are considered constant at the filter size. Z_s denotes the mixture fraction saturation value set equal to 0.5. The mixture fraction segregation factor S_z is defined as :

$$S_z = \frac{Z_v}{\tilde{Z} (Z_s - \tilde{Z})} \quad (6.11)$$

where Z_v is the mixture fraction variance. Finally, the filtered progress variable \tilde{c} is used instead of the time to parametrise the look-up table. It is computed using Eq. (6.5) with $\tilde{Y}_{CO}^{ADF-PCM}$ and $\tilde{Y}_{CO_2}^{ADF-PCM}$ (Eq. 6.9). Finally, the look-up table is parametrised as a function of \tilde{c} , \tilde{Z} , S_z , \tilde{T}_a , \tilde{T}_f and a .

6.1.3 LES transport equations for the ADF-PCM approach

The implementation of the ADF-PCM model in the compressible LES flow solver AVBP (Moureau et al., 2005) requires to add some additional transport equations.

6.1.3.1 Filtered mixture fraction

The mixture fraction Z is defined as a fuel tracer, as already performed in several past studies about Diesel combustion modelling (Colin and Benkenida, 2004). By definition, this tracer is convected and diffused exactly as the species it considers but it is not consumed during the combustion. It varies from 0 for pure air to 1 for pure fuel. The filtered mixture fraction transport equation writes :

$$\frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{Z}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z} \right) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{\rho} (D + D^t) \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right] + \tilde{\Gamma} \quad (6.12)$$

with D and D^t respectively the mass coefficient diffusion and the turbulent mass diffusion coefficient. They are expressed as :

$$D = \frac{\nu}{Sc} \quad (6.13)$$

$$D^t = \frac{\nu^t}{Sc^t} \quad (6.14)$$

where Sc is the Schmidt number equal to 0.75 and Sc^t is the turbulent Schmidt number equal to 0.6. The turbulent viscosity ν^t is modelled via the Smagorinsky model (Smagorinsky, 1963) with a coefficient $C_s = 0.18$. The molecular viscosity ν is computed using a Sutherland law (Sutherland, 1893) assuming the viscosity to be independent of the gas composition and close to that of air. $\bar{\Gamma}$ is the evaporation source term closed as in Spalding (1953) assuming spherical droplets with uniform temperature. It writes :

$$\bar{\Gamma} = \pi \bar{n}_l d \bar{Sh} \frac{\bar{\rho} \bar{\nu}}{Sc} \ln(1 + \bar{B}_M) \quad (6.15)$$

with \bar{n}_l the filtered droplet density and d the droplet diameter. The filtered Sherwood number \bar{Sh} and the filtered mass Spalding number \bar{B}_M are also introduced.

6.1.3.2 Mixture fraction variance

The determination of the mixture fraction segregation factor (Eq. 6.11) requires to transport an equation for the mixture fraction variance Z_v following :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} Z_v}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Z}) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} (D + D^t) \frac{\partial Z_v}{\partial x_j} \right] + 2\bar{\rho} (D + D^t) \left| \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right|^2 \\ &- \overline{2\rho D \left| \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right|^2} + \dot{S}_{Z_v} \end{aligned} \quad (6.16)$$

The variance source term due to evaporation \dot{S}_{Z_v} is modelled following Pera et al. (2006), with a coefficient $\alpha_{\dot{w}}$ set to 0.5.

$$\dot{S}_{Z_v} = 2\bar{\rho} \alpha_{\dot{w}} Z_v \left(\frac{\bar{\Gamma}}{\tilde{Z}} \right) \quad (6.17)$$

Equation (6.16) also introduces the filtered scalar dissipation rate computed in the CFD code as :

$$\begin{aligned} \bar{\rho} \tilde{\chi} &= \overline{\rho D \left| \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right|^2} \\ &= \bar{\rho} D \left| \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right|^2 + \left(\overline{\rho D \left| \frac{\partial Z}{\partial x_j} \right|^2} - \bar{\rho} D \left| \frac{\partial \tilde{Z}}{\partial x_j} \right|^2 \right) \\ &= \bar{\rho} \tilde{\chi}_{RES} + \bar{\rho} \tilde{\chi}_{SGS} \end{aligned} \quad (6.18)$$

The resolved part $\tilde{\chi}_{RES}$ of the total dissipation rate is directly computed from the filtered mixture fraction fields. In order to close the subgrid-scale part, a classical equilibrium hypothesis between production and dissipation (Pierce and Moin, 1998) of the mixture fraction segregation is retained, leading to a linear relaxation of Z_v :

$$\chi_{SGS} = \frac{D^t}{\Delta^2} Z_v \quad (6.19)$$



with Δ the characteristic size of the filter chosen equal to the cell characteristic size. The strain rate a is then computed in the CFD code from the filtered scalar dissipation rate value :

$$a = \frac{\tilde{\chi}}{\int_{Z=0}^{Z_s} F(Z)\tilde{P}(Z)dZ} \quad (6.20)$$

6.1.3.3 Filtered fresh gases temperature

In the ADF-PCM model, the approximated diffusion flames are computed for different linear temperature stratifications $T_u(Z)$ which are characterised by the temperatures of fuel and air boundary conditions. They are determined in the CFD code using transport equations for the unburnt gases \tilde{T}_u at $Z = \tilde{Z}$ and the air temperature \tilde{T}_a at $Z = 0$. The filtered fuel temperature \tilde{T}_f is then reconstructed by linear extrapolation as shown on Fig. 6.2.

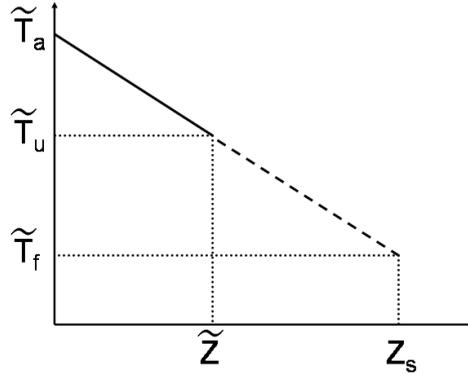


FIGURE 6.2 – Scheme of the extrapolation of the fuel temperature \tilde{T}_f from the fresh air \tilde{T}_a and fresh gases temperature \tilde{T}_u .

The filtered fresh gas temperature \tilde{T}_u and the filtered fresh air temperature \tilde{T}_a are determined from their respective filtered enthalpy transport equations. The temperatures are deduced from the enthalpies using the mass fractions of the species composing either (fuel or air) stream, for which model transport equations are solved (Jay and Colin, 2011).

Concerning the fresh gas temperature, its filtered enthalpy \tilde{H}_u is transported as :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{\rho} \tilde{H}_u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\tilde{\rho} \tilde{u}_j \tilde{H}_u) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\tilde{\rho} \left(\frac{\nu}{\text{Pr}} + \frac{\nu^t}{\text{Pr}^t} \right) \frac{\partial \tilde{H}_u}{\partial x_j} \right] + \overline{\tau_{ij}} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \\ &+ \frac{\tilde{\rho}}{\rho_u} \frac{D\tilde{P}}{Dt} + \tilde{\Gamma} (\tilde{H} - \tilde{H}_u) + \dot{S}_{H_u} \end{aligned} \quad (6.21)$$

where \dot{S}_{H_u} denotes the evaporation source term modelled as :

$$\dot{S}_{H_u} = \bar{\Lambda} + \bar{\Phi} \quad (6.22)$$

The filtered enthalpy transfer terms by phase change $\bar{\Lambda}$ and filtered thermal conduction between liquid and gas $\bar{\Phi}$ write (Spalding, 1953) :

$$\bar{\Lambda} = \bar{\Gamma} h_{s,F}(T_l) \quad (6.23)$$

$$\bar{\Phi} = \pi \bar{n}_l d \bar{N} \bar{\lambda} (T_l - \tilde{T}) \quad (6.24)$$

In these equations, the liquid temperature T_l and the sensible enthalpy of the liquid fuel $h_{s,F}$ at the reference temperature T_l are introduced. The filtered Nusselt number $\bar{N} \bar{\lambda}$ is also introduced. Finally the Prandtl number Pr is equal to 0.75 and the turbulent Prandtl number Pr^t is equal to 0.6.

The filtered fresh air enthalpy is transported as :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{H}_a}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{H}_a) &= \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\bar{\rho} \left(\frac{\nu}{\text{Pr}} + \frac{\nu^t}{\text{Pr}^t} \right) \frac{\partial \tilde{H}_a}{\partial x_j} \right] + \bar{\tau}_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \\ &+ \frac{\bar{\rho}}{\rho_a} \frac{D\bar{P}}{Dt} + \bar{\Gamma} (\tilde{H} - \tilde{H}_a) + \dot{S}_{H_a} \end{aligned} \quad (6.25)$$

with \dot{S}_{H_a} the source term for the evaporation defined as :

$$\dot{S}_{H_a} = \bar{\Phi} \quad (6.26)$$

This transport equation represents a fictive unburnt state formed by air in a mixing between air and liquid fuel droplets. Conductive enthalpy exchanges due to temperature differences between liquid and gas are considered via the $\bar{\Phi}$ term. The specificity of this equation is its conditioning at $Z = 0$, where no evaporation occurs. As a result, this equation is similar to Eq. (6.21) except that it does not take into account evaporation.

6.1.4 Numerical set-up

The spray H (Siebers and Higgins, 2001; Siebers et al., 2002; Idicheria and Pickett, 2007b) investigated by Sandia National Laboratories (ECN, 2012) has been simulated using the developed ADF-PCM model. It consists of liquid n-heptane fuel injected at high pressure into a constant volume vessel of approximately cubic shape with an edge length of 108 mm. It provides measurements in terms of liquid and gas penetration, pressure and flame lift-off based on OH chemiluminescence (Siebers and Higgins, 2001).

A pre-combustion is used to obtain pressure and temperature conditions prior to the start of injection that are close to those found in Diesel engines. For the simulated case, the pressure at start of injection (SOI) is 42.25 bar, the density 14.8 kg.m^{-3} and the temperature 1000 K. The liquid n-heptane fuel is injected at 1500 bar and 373 K during 6.8 ms, leading to a total injected mass of 17.8 mg. Details can be found on the ECN web site (ECN, 2012).



O_2	N_2	% EGR	CO_2	H_2O
0.21	0.6933	0	0.0611	0.0356
0.15	0.7515	28.57	0.0623	0.0362
0.12	0.7806	42.86	0.0628	0.0365
0.08	0.8195	61.90	0.0636	0.0369
0.00	0.8971	/	0.0652	0.0377

TABLE 6.1 – Initial molar fractions of the mixture in the vessel at SOI.

The different initial compositions investigated are presented in Tab. 6.1. The presence of CO_2 and H_2O is due to the pre-combustion phase, necessary to reach Diesel conditions. As the mass fractions of these species are small, they are not considered in the simulations and replaced by N_2 . The experiment exhibits four reactive cases with different initial mass fractions of O_2 . Oxygen in the initial gases is gradually replaced by N_2 in order to mimic effects of dilution by EGR (Siebers et al., 2002). Four ADF-PCM look-up tables are built, each of them representing one EGR rate. The last case with no oxygen corresponds to an inert case dedicated to the determination of liquid and gas penetration.

The discretisation of the look-up tables may have a strong influence on the results. In the present simulation, we used the discretisation shown in Tab. 6.2. In order to limit the number of points while keeping a good accuracy, the mixture fraction, the progress variable and the strain rate are non-linearly discretised.

Input variable	Number of discretisation points	Range
Progress variable \tilde{c}	41	0 - 1
Mixture fraction \tilde{Z}	24	0 - 0.5
Mixture fraction segregation S_z	6	0 - 1
Air temperature \tilde{T}_a	4	700 - 1000 K
Fuel temperature \tilde{T}_f	4	400 - 1000 K
Strain rate a	11	0 - 8000 s^{-1}

TABLE 6.2 – Look-up table discretisation for each input variable of the ADF-PCM model.

The LES of these five cases were achieved using the fully compressible flow solver AVBP for unstructured hybrid meshes (Moureau et al., 2005) using a second order explicit Lax-Wendroff scheme (Lax and Wendroff, 1960). Subgrid-scale turbulence is modelled with the Smagorinsky model (Smagorinsky, 1963) using a constant coefficient $C_s = 0.18$.

The description of the gaseous phase is based on spatially filtered Navier-Stokes equations. It introduces transport equations for the momentum conservation as well as the species and the energy. The liquid spray is described using a mesoscopic Eulerian formalism (MEF) initially developed by [Fevrier et al. \(2005\)](#) and adapted for piston engine conditions by [Martinez et al. \(2010\)](#). It requires introducing conservation equations for the droplets density, the volume fraction, the momentum, the sensible enthalpy and the uncorrelated energy resulting from the mesoscopic formalism. As MEF is only valid in regions of small liquid volume fractions, the DITurBC (Downstream Inflow Turbulent Boundary Condition) model is used. It consists in displacing the injection boundary condition downstream from the nozzle exit where the liquid volume fraction is small. Liquid and gas velocities, liquid and gas mass fractions and droplets distribution imposed on the displaced boundary conditions are determined using correlation detailed in [Martinez et al. \(2010\)](#).

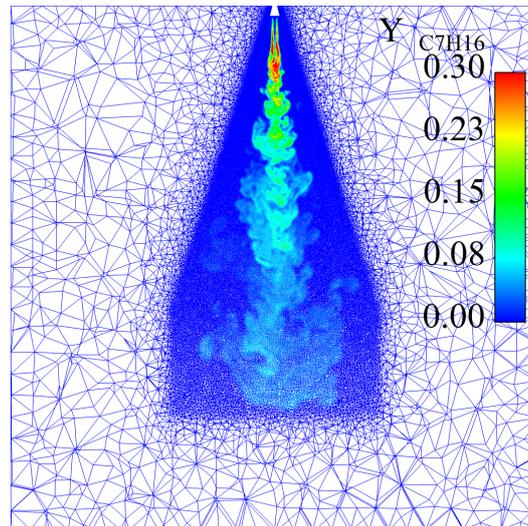


FIGURE 6.3 – Computational mesh in a cut plane through the injector in which the fuel mixture fraction at 2.5 ms is displayed.

Figure 6.3 displays a cut plane of the mesh used for these simulations. The mesh is composed of 22.1 million tetrahedral cells with a characteristic size of $60 \mu\text{m}$ close to the DITurBC inflow plane which gradually increases up to $600 \mu\text{m}$ at the end of the refined area. The mesh outside the cone is coarse in order to limit the overall mesh size. In this figure, the fuel mixture mass fraction is displayed for a range from 0 to 0.3. In the calculation, the filtered fuel mass fraction goes up to around 0.38, which is still far from Z_s chosen equal to 0.5.

The computation of 1 ms of physical time on a non-reactive case required 9h on 120 processors on the CCRT Titane cluster (Linux Bull NovaScale R422). It reaches 23h on 400 processors for a reactive case, mainly because of the additional transport equations (for ADF-PCM model and additional species) and the time step limitation due to the combustion.



6.1.5 Results and discussion

6.1.5.1 Spray formation

The validation of the LES prediction of the spray is performed by comparing liquid and gas penetrations with experimental findings for the non-reactive case (0% of O_2). This is achieved by following in time the evolution of the smallest axial distance from the injector outlet at which a specific variable reaches a threshold value. The threshold values used to post-process the LES are those proposed by the ECN group : a liquid volume fraction $\alpha_l = 0.0015$ for liquid penetration and a mixture fraction $Z = 0.001$ for gas penetration.

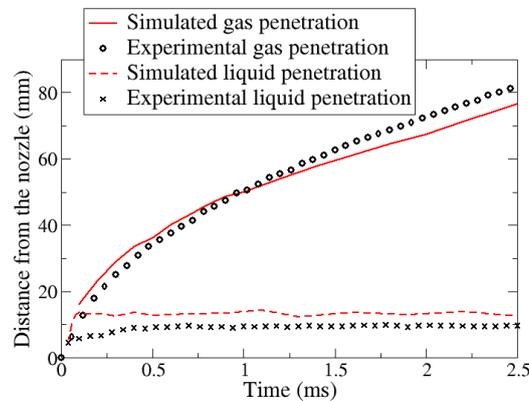


FIGURE 6.4 – Temporal evolution of the liquid and gas penetrations for simulation and experiment.

Figure 6.4 shows the temporal evolution of liquid and gas penetrations. Numerical and experimental liquid penetrations very fast reach a nearly constant value which is slightly overestimated by the LES compared to the experimental one. Even so, the LES predicted liquid penetration lower than the minimal LOL value observed which should limit the possible influence of liquid on combustion. The gas phase penetration is accurately reproduced with a small under-estimation after 1.5 ms.

6.1.5.2 Reference case without EGR

Figure 6.5 presents the evolution of the chamber pressure variation (on the left) and the HRR (on the right). The latter is deduced from the former using integral thermodynamic relations. Before $t=0.380$ ms, almost no heat release is visible, as the spray is forming, creating by evaporation and mixing with ambient gas allowing chemical reactions. After this induction phase, the auto-ignition of the so formed pre-mixture eventually leads after $t=0.380$ ms to a non-zero combustion heat release, and to an increase of pressure. The HRR curve exhibits a strong peak until $t=0.500$ ms,

as a result of the burning of the premixture formed in the induction phase. It is consumed fast in what is generally called the premixed phase of Diesel combustion. After $t=0.500\text{ms}$ the HRR reaches an almost constant value, leading to a linear increase of pressure with time. This phase corresponds to the non-premixed phase of Diesel combustion. This HRR profile is typical of Diesel combustion (Pickett et al., 2005). The temporal description of the combustion can be spatially observed on Fig. 6.6 showing the temperature fields for different times after SOI. The snapshot at 0.380 ms shows the first auto-ignition spots, characterised by a temperature rise. They are located in regions of lean mixture fractions ($Z \approx 0.05$) in the downstream part of the jet, which is consistent with experimental observations (Pickett et al., 2005). The combustion then rapidly propagates and reaches the leading edge of the spray 0.550 ms after the SOI. The snapshots at $t = 1.0$ ms and 2.5 ms correspond to the non-premixed phase characterised by an almost constant HRR. The flame is anchored at a quasi-fixed axial position called the LOL. It is defined as the minimum axial location for which the temperature rise reaches half of the maximal temperature rise in the domain (Bekdemir et al., 2012). This temperature T_{lift} writes :

$$T_{lift} = \frac{T_{init} + T_{max}}{2} \quad (6.27)$$

where T_{init} is the temperature of the ambient gas before injection and T_{max} is the maximal temperature in the domain. The time evolution of the LOL is presented on Fig. 6.7. It confirms that the combustion starts downstream in the spray and rapidly propagates upstream towards the injector until it stabilises. The experimentally observed stable LOL is accurately reproduced by the present LES.

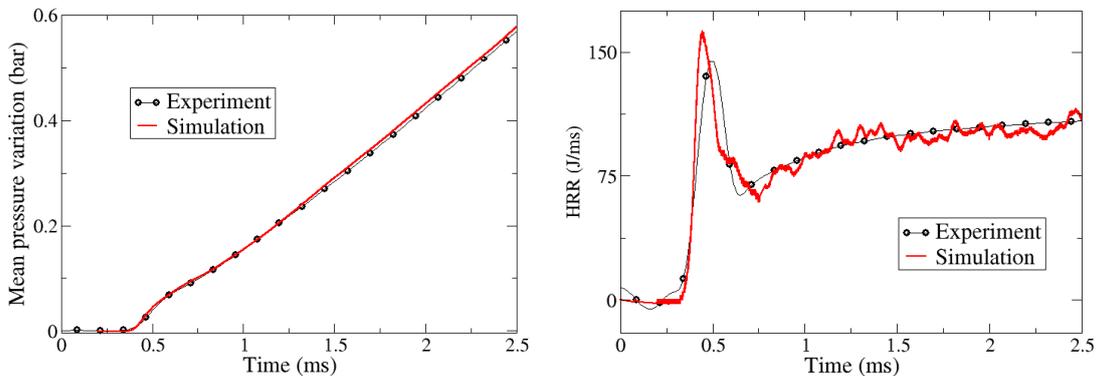


FIGURE 6.5 – Temporal evolution of the mean pressure variation (left) and the HRR (right) for the 0% EGR experiment and simulation.

6.1.5.3 Predicting the impact of increasing EGR rate

Figure 6.8 compares experimental and simulated pressure rise (left) and HRR (right) against time for the four studied EGR rates. The HRR peak during the premixed phase decreases with increasing EGR rate, as a direct consequence of the slower chemistry resulting from O_2 depletion



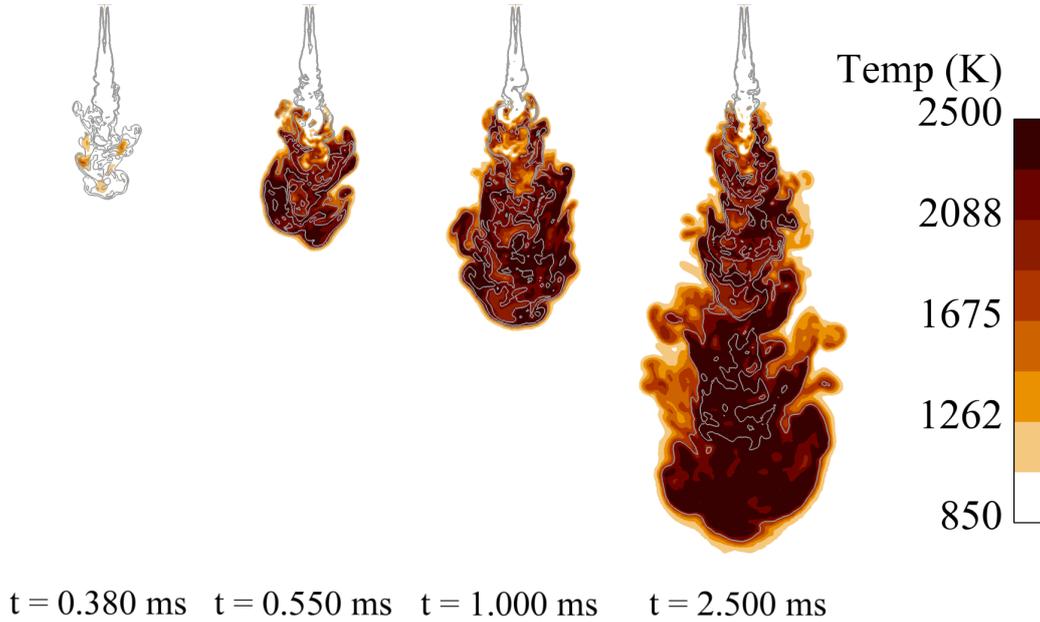


FIGURE 6.6 – Temperature fields at four different times after SOI for the configuration with 0% EGR. The grey lines represent equivalence ratio isolines at 0.5, 1 and 2.

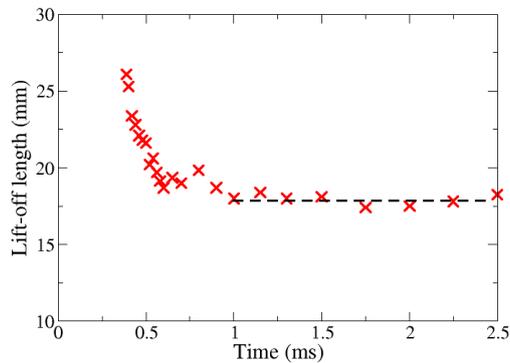


FIGURE 6.7 – Temporal evolution of the LOL for the LES of the 0 % EGR case. The dashed line represents the experimental stabilised LOL value.

(Idicheria and Pickett, 2007a). Increasing the EGR rate is found to have a negligible effect on the constant HRR level reached in the non-premixed phase, which remains the same for all studied EGR rates. This confirms the view presented in (Siebers et al., 2002) that in the stabilised diffusion combustion phase in which the flame is anchored at the stabilized LOL, lowering the O_2 mass fraction in the initial fresh mixture is compensated by an increased LOL that increases the mixing time prior to combustion. As a result, both effects cancel each other. For all the EGR cases except the highest one, the ADF-PCM model accurately predicts the magnitude of the HRR premixed peak as well as the HRR plateau. Nevertheless the auto-ignition delays and the time occurrence of the HRR premixed peak are increasingly under-estimated with increasing

EGR rates. It results in a correct reproduction of the experimental pressure curve for low EGR rates which deteriorates for high EGR rate.

The auto-ignition delay, defined as the time to reach a mean pressure rise of 1% of the mean pressure rise at 2.5 ms, is presented on Fig. 6.9 as a function of the EGR rate. The value predicted by the present LES increases with EGR, reproducing the experimentally observed trend. However the LES increasingly underpredicts experimental values as the EGR rate is increased.

Figure 6.10 compares numerical and experimental LOL as a function of the EGR rate. The ADF-PCM model qualitatively reproduces the effect of the EGR to increase the LOL. Predictions show good agreement for cases without or with medium EGR. For the highest EGR rates however, the LOL is under-estimated.

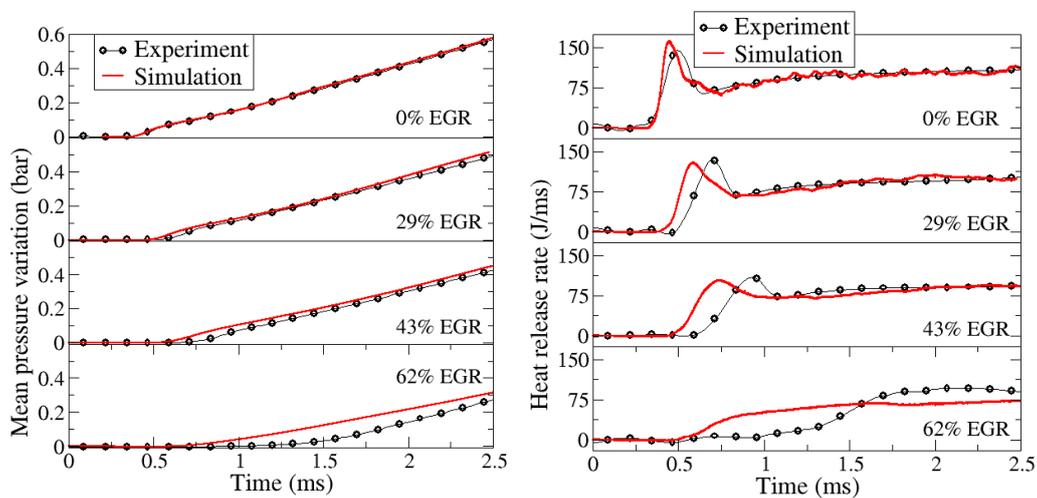


FIGURE 6.8 – Temporal evolution of the mean chamber pressure (left) and the HRR (right) in the experiment and simulation for the four EGR rates.

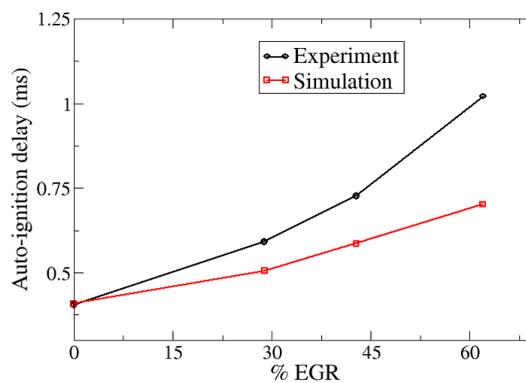


FIGURE 6.9 – Auto-ignition delay as a function of the EGR rate.

LES successfully predicts combustion for cases with no or medium EGR rates but its accuracy decreases with increasing EGR, especially for cases with EGR rates superior to 43%. This may be



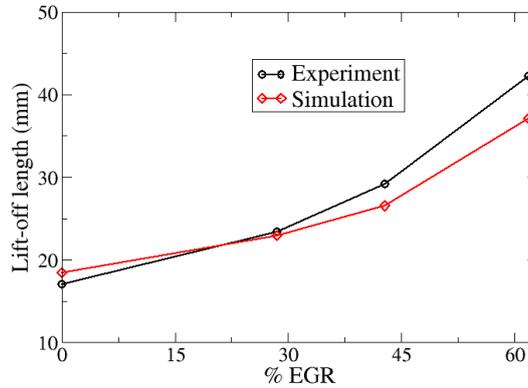


FIGURE 6.10 – Evolution of the LOL as a function of the EGR rate.

related to the chemical scheme which has not been validated for oxygen mass fraction under 0.17, which in the present case would correspond to 19% of EGR. Another explanation concerns the mesh resolution. With higher EGR, the auto-ignition occurs farther from the injector nozzle, in coarser regions. Finally, the flamelet hypothesis might be blame as the addition of EGR decreases reaction rates magnitude and therefore impacts the Damköhler number.

6.1.6 Conclusion

A LES formulation of the ADF-PCM turbulent combustion model based on auto-igniting strained diffusion flamelets. It was coupled to an Eulerian mesoscopic formalism to be able to study liquid spray combustion. The models were implemented into the AVBP flow solver and applied to the LES of the spray H experiment from Sandia national laboratories (ECN, 2012). The chemistry of the liquid n-heptane that is injected into a constant volume chamber under Diesel like conditions was tabulated using the Seiser et al. (2000) semi-detailed scheme containing 770 reactions among 159 species. The liquid spray was described using a mesoscopic formalism coupled with the DITurBC model for the injection (Martinez et al., 2010).

For the reference case with no EGR, the reproduction of experimental findings by the presented LES was very accurate, with a very good reproduction of the experimentally observed mean chamber pressure evolution, HRR, auto-ignition delay and LOL. The impact of increasing the EGR rate was qualitatively reproduced, with an increase of the auto-ignition delay and of the LOL, while preserving an identical HRR once the flame has reached its stable position. However the quantitative prediction deteriorates as EGR rate is increased, with an increasing underestimation of the auto-ignition delay and LOL with increasing EGR. This is particularly true for the highest studied EGR rate of 62%, for which the LES predicts a too fast combustion compared to the experimental findings. The Seiser chemical scheme might be blame for this poor reproduction of the impact of increasing EGR rate as it has not been validated for low O₂ concentrations (i.e. high EGR rates). Other possible explanations concern the mesh refinement

which is coarser far from the nozzle where high EGR cases auto-ignites and the validity of the flamelet approach, as EGR decreases the reaction rates magnitude. This will be the subject of future work.



6.2 Résultats complémentaires

6.2.1 Évolution de la hauteur d'accrochage

Les résultats obtenus par le modèle ADF-PCM ont été comparés à l'expérience pour les grandeurs classiquement utilisées pour caractériser la combustion Diesel : la courbe de pression moyenne (et le dégagement de chaleur associé), le délai d'auto-inflammation et la hauteur d'accrochage de la flamme (LOL). De façon à pousser encore plus loin les comparaisons entre l'expérience et la simulation, nous nous intéressons ici à l'évolution temporelle du LOL.

Les LOL expérimentales ont été déterminées à partir de mesures de chimiluminescence OH moyennées sur de nombreuses réalisations ($\approx 150 - 200$) (Idicheria and Pickett, 2007a). Celles-ci permettent de capter la présence de OH^* , l'état excité de la molécule OH représentatif des réactions de chimie à haute température. Un seuil d'intensité de 20 sur l'échelle du capteur allant de 0 à 255 (255 étant la valeur maximale de luminescence OH^* observée) a été choisi pour définir le LOL. L'état OH^* n'étant pas présent dans les mécanismes cinétiques que nous utilisons, une méthode alternative pour la détermination du LOL a dû être définie. Dans la littérature, de nombreuses méthodes permettant de déterminer le LOL coexistent (Azimov et al., 2010; Bekdemir et al., 2012; Tap and Veynante, 2004) et leur choix reste une question ouverte. Nous utiliserons dans les présents travaux la définition basée sur la température, introduite dans la Section 6.1.5.2. Il est à noter que, pour les résultats présentés dans cette section, les LOL obtenus à des temps voisins du délai d'auto-inflammation sont particulièrement sensibles à la définition utilisée. Pour cette raison, nous nous limiterons ici à des comparaisons qualitatives de la hauteur de LOL. Cela nous permettra de vérifier la capacité du modèle ADF-PCM à reproduire qualitativement la dynamique du LOL et l'influence du taux d'EGR sur celle-ci.

La figure 6.11 compare les évolutions temporelles des LOL obtenues par l'expérience et la simulation pour trois taux d'EGR : 0%, 29% et 43%. Les résultats expérimentaux montrent que pour le cas sans EGR, le critère de détermination du LOL est atteint pour la première fois à environ 30 mm de l'injecteur, 0,480 ms après le début de l'injection. La combustion se propage ensuite vers le nez de l'injecteur jusqu'à atteindre une valeur stabilisée de LOL. La LES reproduit correctement la dynamique de la combustion, s'initiant loin de l'injecteur et se propageant ensuite vers celui-ci jusqu'à se stabiliser. Les valeurs du LOL stabilisé prédites par l'expérience et la simulation sont particulièrement proches mais des différences sont observées à des temps proches du délai d'auto-inflammation. Le critère de détermination du LOL utilisé dans la simulation est atteint plus tôt et à une plus faible distance de l'injecteur que pour l'expérience. Avec l'augmentation du taux d'EGR, le critère expérimental de détermination du LOL est atteint de plus en plus tard et de plus en plus loin de l'injecteur. Le LOL stabilisé augmente lui aussi. La LES reproduit en partie cet effet des EGR. Néanmoins, les différences entre les profils obtenus par la LES et l'expérience augmentent avec le taux d'EGR. Cela est particulièrement visible pour le cas à 43 % d'EGR. Dans ce cas, la LES sous-estime fortement la hauteur et le délai d'obtention

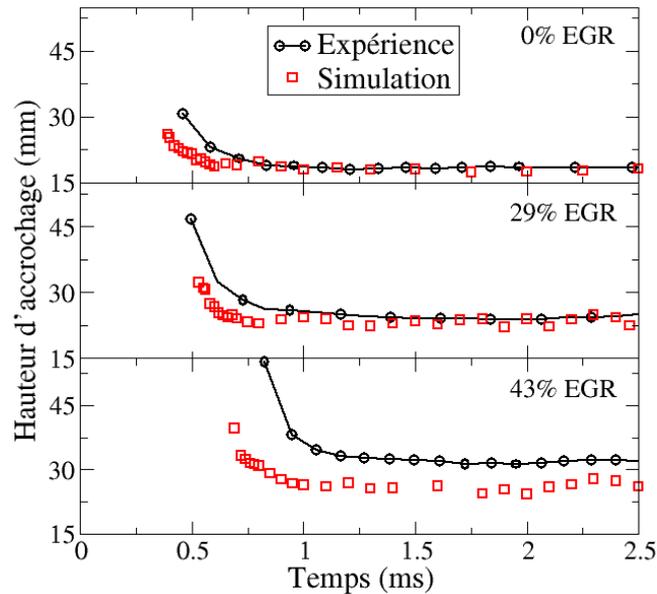


FIGURE 6.11 – Évolution du LOL pour 0%, 29% et 43% d'EGR.

de la première valeur du LOL. C'est de plus le seul cas pour lequel le LOL stabilisé n'est pas précisément reproduit.

Le modèle ADF-PCM se montre capable de reproduire qualitativement la dynamique de la combustion dans un cas sans EGR. Il prédit un LOL initialement important mais diminuant rapidement pour atteindre un état stabilisé. Néanmoins les différences entre les résultats expérimentaux et la simulation augmentent avec le taux d'EGR. Ces différences sont en partie dues à la reproduction uniquement qualitative de l'influence des EGR sur la combustion, comme nous l'avons précédemment montré (Sect. 6.1.5.3). De plus, nous comparons ici un LOL expérimental moyenné sur de nombreuses réalisations à un LOL extrait d'une seule LES. Cette différence de méthodologie a probablement peu d'influence pour la détermination de la valeur stabilisée du LOL. Néanmoins, le délai d'auto-inflammation et surtout sa localisation peuvent varier d'une réalisation à une autre, affectant fortement le profil de LOL aux premiers instants de la combustion. L'étude de la variabilité expérimentale de ces paramètres pourrait permettre de conclure quant à l'influence de l'utilisation d'une seule LES pour déterminer le LOL et son évolution. Enfin, nous comparons un LOL basé sur la température pour la LES et sur le OH^* pour la simulation. Ces différentes définitions expliquent probablement pourquoi, pour le cas à 0%, le délai d'obtention du premier LOL est plus faible pour la LES que pour l'expérience alors que les délais d'auto-inflammation sont identiques (Sect. 6.1.5.3).



6.2.2 Influence du maillage

A l'origine, la simulation du Spray H a été réalisée sur un maillage A contenant 4.9 millions de cellules. La taille caractéristique de la maille est de $80 \mu\text{m}$ au niveau de l'injecteur et décroît linéairement jusqu'à l'extrémité de la zone raffinée pour atteindre $800 \mu\text{m}$ (Fig. 6.12). De façon à vérifier l'impact du raffinement sur les résultats, un second maillage (B) a été mis en place. La même méthodologie a été appliquée mais pour des tailles caractéristiques différentes : $60 \mu\text{m}$ au niveau de l'injecteur et $600 \mu\text{m}$ à l'extrémité de la zone raffinée (Fig. 6.12). Cette configuration conduit à un maillage de 22.1 millions de cellules. Nous pouvons remarquer que les zones raffinées des deux maillages possèdent de petites différences. La zone raffinée du maillage B a été spécialement conçue, à partir des résultats du calcul sur le maillage A, de façon à être la plus réduite possible et ainsi limiter la taille du maillage B. Ces deux maillages sont comparés dans cette section sur un cas non-réactif puis sur un cas réactif.

6.2.2.1 Influence du maillage pour la configuration non-réactive

Dans un premier temps, nous nous intéressons à la structure des champs de fraction massique de carburant obtenue par les deux maillages à 2.5 ms. Ceux-ci sont présentés par la figure 6.12.

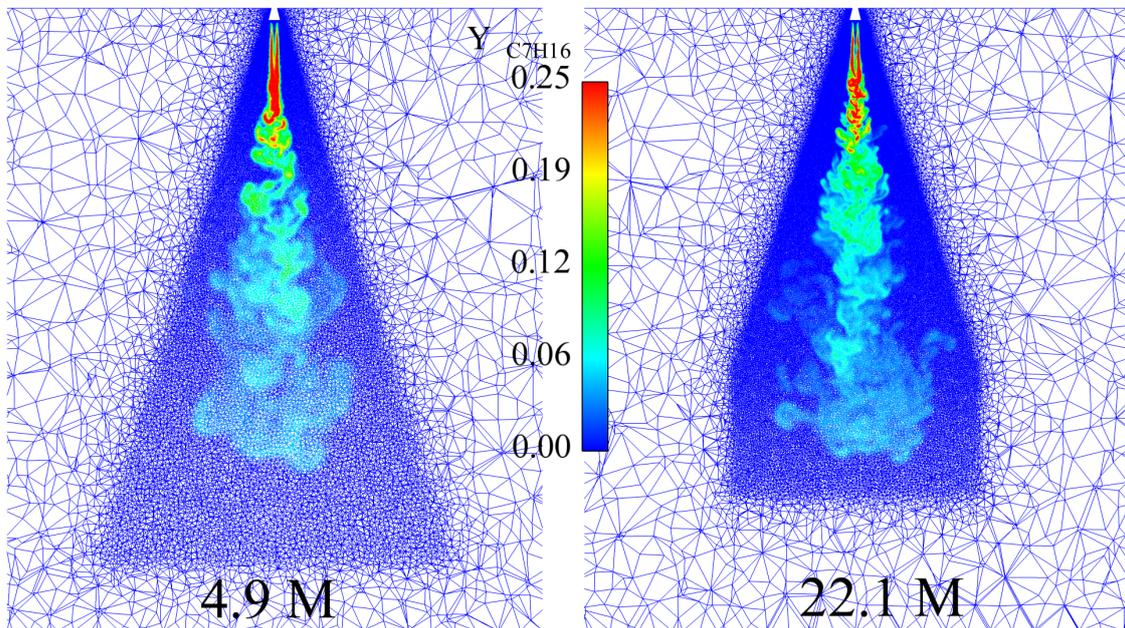


FIGURE 6.12 – Champs de fraction massique de carburant à 2,5 ms pour les maillages à 4,9 (A) et 22,1 millions de cellules (B).

Visuellement, ces deux sprays semblent posséder des caractéristiques globalement similaires. Néanmoins nous observons que l'écoulement obtenu sur le maillage B présente logiquement plus de petites structures turbulentes. Cette différence est particulièrement visible dans la zone à

proximité de l'injecteur. L'apparition de structures turbulentes indiquant un état turbulent pleinement développé semble être retardée dans le cas du maillage le moins raffiné. La figure 6.13 présente l'évolution des pénétrations liquides et gazeuses en fonction du temps. Concernant la pénétration liquide, le maillage n'a, dans le cas présent, aucune influence. Les pénétrations liquides obtenues par la LES sont identiques quel que soit le maillage utilisé et surestiment les pénétrations expérimentales. Concernant les pénétrations gazeuses, les deux maillages conduisent à des résultats relativement proches de l'expérience. Jusqu'à 1 ms, les longueurs de pénétration sont similaires. Des différences significatives sont ensuite observables, les résultats obtenus par le maillage B sous-estimant légèrement la pénétration gazeuse. La pénétration gazeuse obtenue par le maillage A reste quant à elle proche des pénétrations gazeuses expérimentales. Deux phénomènes opposés jouent un rôle dans les différences observées en termes de pénétration gazeuse. Lorsque l'on raffine le maillage, la diffusion liée au schéma numérique décroît. Le spray est donc moins ouvert et pénètre plus loin. Au contraire, le raffinement du maillage va augmenter le nombre et l'importance des structures turbulentes, l'échelle de filtrage étant définie par la taille de maille. Cela va avoir un effet contraire au phénomène précédent, augmentant l'ouverture du spray et diminuant la pénétration gazeuse. Les résultats obtenus par le maillage B prédisant une pénétration gazeuse moins importante que ceux du maillage A, l'effet de la turbulence semble prépondérant sur l'effet diffusif du schéma numérique.

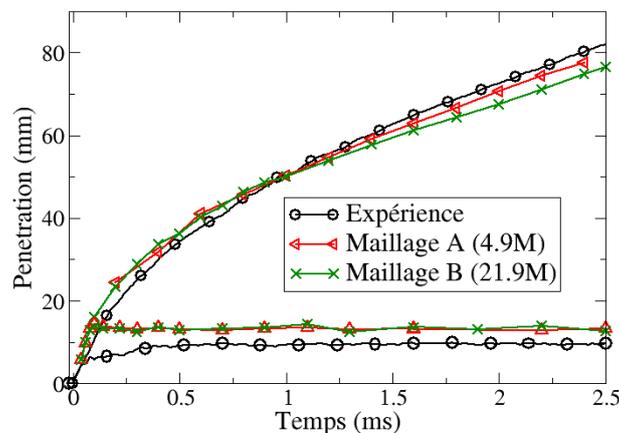


FIGURE 6.13 – Évolution des pénétrations liquides (courbes inférieures) et gazeuse (courbes supérieures) obtenues pour l'expérience et la LES pour les maillages A et B.

De façon à investiguer en détail l'influence du maillage sur l'écoulement, la seule comparaison des pénétrations gazeuses n'est pas suffisante. Nous nous intéressons maintenant aux profils radiaux moyens à 17 mm, 25 mm et 30 mm de l'injecteur. Les profils expérimentaux ont été moyennés sur de nombreuses réalisations ($\approx 150 - 200$) (Idicheria and Pickett, 2007a). Les temps de calcul nécessaires à la réalisation de moyennes utilisant cette procédure étant beaucoup trop importants en LES, une autre approche a dû être utilisée. Les profils moyens pour la LES ont été obtenus en calculant une moyenne temporelle entre 2 et 2.5 ms, puis en réalisant une moyenne azimutale tous les 36° . La figure 6.14 présente, pour le maillage raffiné, le champ moyenné de la fraction



massique de carburant entre 2 et 2,5 ms, pour lequel les distances 17 mm, 25 mm et 30 mm sont indiquées. Nous pouvons observer que le champ de carburant moyen semble être convergé jusqu'à environ 16 mm. Au-delà, le jet montre des fluctuations. Une moyenne temporelle entre 2 et 2,5 ms s'avère donc insuffisante pour obtenir des profils convergés pour des points situés loin de l'injecteur.

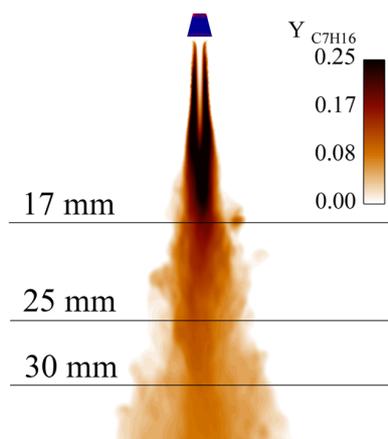


FIGURE 6.14 – Champ de la fraction massique de carburant moyenné temporellement entre 2 et 2,5 ms.

La figure 6.15 présente les profils radiaux moyens de la fraction massique de carburant à 17 mm, 25 mm et 30 mm de l'injecteur. A 17 mm de l'injecteur, le profil de carburant est particulièrement bien prédit pour le maillage B. Au contraire, le maillage A prédit un jet moins ouvert avec une fraction massique de carburant plus importante en son centre. A 25 mm et 30 mm de l'injecteur, les deux maillages prédisent des profils similaires. Tous deux présentent une légère sous-estimation de la fraction massique au centre du jet, croissante avec la distance à l'injecteur. Cet écart peut être expliqué par la figure 6.14 précédemment présentée. La réalisation d'une moyenne entre 2 et 2.5 ms n'est probablement pas suffisante pour que les profils les plus éloignés de l'injecteur soient convergés.

Les deux maillages prédisent des profils similaires exceptés à 17 mm de l'injecteur. Cette différence provient de la déstabilisation du jet, plus précoce pour le cas le plus raffiné (Fig. 6.12). La discrétisation du maillage A semble donc insuffisante pour les zones les plus proches de l'injecteur.

6.2.2.2 Effets sur le cas réactif

Les différences de prédiction pour les deux maillages sont maintenant étudiées sur le cas réactif sans EGR. Les résultats obtenus par l'expérience et la simulation pour les deux maillages sont comparés en termes de variation de pression et de dégagement de chaleur sur la figure 6.16 et en termes de délai d'auto-inflammation et de LOL sur la figure 6.17. Les courbes de pression et de dégagement de chaleur ne sont présentées que de 0 à 1 ms puisque peu de différences sont

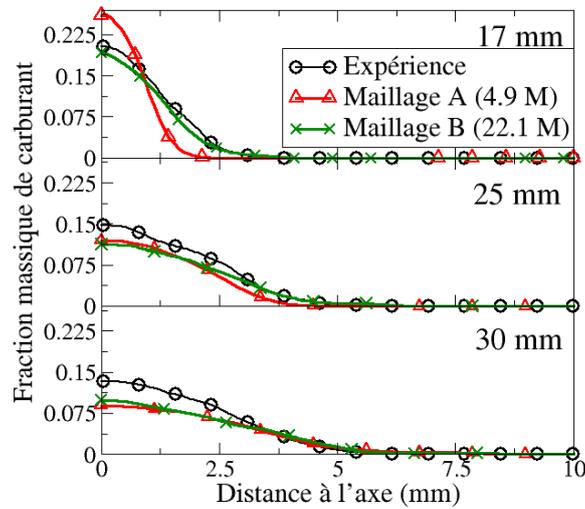


FIGURE 6.15 – Profils radiaux de la fraction massique moyenne de carburant à 17, 25 et 30 mm de l’injecteur.

observées après la phase de prémélange.

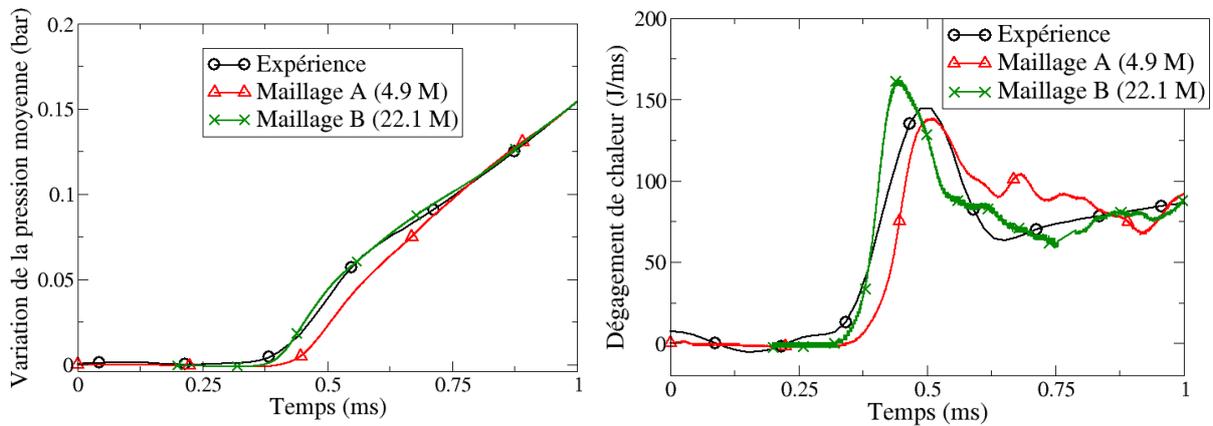


FIGURE 6.16 – Évolution de la variation de la pression moyenne (à gauche) et du dégagement de chaleur (à droite) pour l’expérience et les deux maillages.

A 1 ms, aucune différence n’est observée entre les résultats obtenus à partir des maillages A et B. L’élévation de pression prédite est de plus identique à l’expérience. C’est pour des temps plus faibles que les deux maillages se différencient. L’élévation de pression obtenue pour le maillage B est plus proche des résultats expérimentaux que celle du maillage A. Les résultats de ce dernier prédisent une élévation de pression légèrement plus tardive. La figure 6.17 vient confirmer ces observations. Le délai d’auto-inflammation obtenu dans l’expérience est très proche de celui obtenu par la LES pour le maillage B. La simulation utilisant le maillage A prédit quant à elle un délai d’auto-inflammation surestimé de 0.048 ms. Outre le léger décalage de l’auto-inflammation, les résultats des simulations en terme de dégagement de chaleur sont globalement similaires



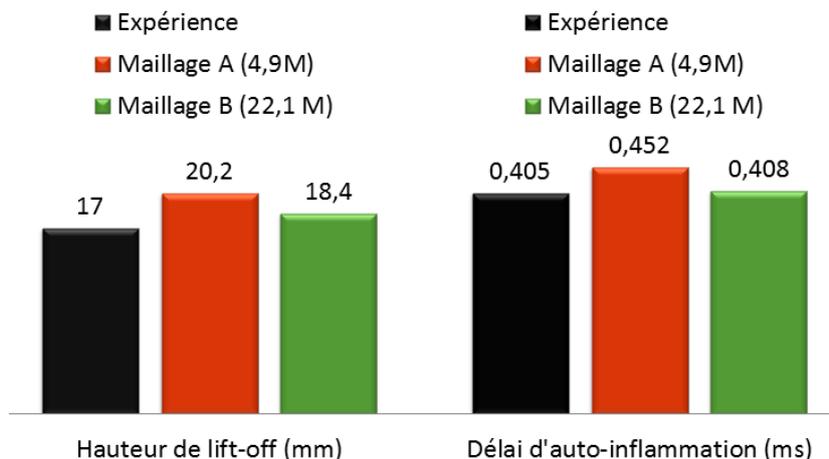


FIGURE 6.17 – Comparaison du LOL (à gauche) et du délai d’auto-inflammation (à droite) pour l’expérience et les deux maillages.

et assez proches des résultats expérimentaux quel que soit le maillage utilisé. Nous pouvons néanmoins observer que pour le maillage A, le pic de dégagement de chaleur prédit est légèrement plus faible que celui obtenu pour le maillage B, et ce malgré le fait que celui-ci intervienne plus tard, dans un environnement où une quantité plus importante de carburant a eu le temps de se mélanger. Enfin, les LOL obtenues par ces deux maillages présentent de légères différences. Comme nous pouvons le voir sur la figure 6.17, la simulation surestime le LOL quel que soit le maillage utilisé. Néanmoins, cette surestimation reste plus faible pour la simulation utilisant le maillage B que celle utilisant le maillage A.

Ces comparaisons indiquent donc que le maillage possède une influence sur les résultats mais que celle-ci reste relativement limitée, surtout après le pic de dégagement de chaleur de la phase de prémélange. Néanmoins l’observation des champs de température aux temps $t = 2.00$, $t = 2.25$, $t = 2.50$ et $t = 2.75$ ms pour le maillage A présenté par la figure 6.18 montre la limite de cette analyse. Comme nous pouvons le voir, le LOL n’est pas constant. Après une phase relativement stable entre 1 et 2 ms, celui-ci diminue de plus en plus vite. La combustion se propage sur les bords du spray, là où les vitesses restent modérées et les faibles fractions de mélange induisent de fortes températures. Nous pouvons observer que le LOL expérimental se situe à 17 mm de l’injecteur, distance pour laquelle le maillage A prédit un écoulement en phase de transition laminaire turbulente. Le maillage B prédit quant à lui un écoulement pleinement turbulent à cette distance (Fig. 6.12). Le retard dans le développement de la turbulence résolue, dû à un maillage localement trop grossier, semble être à l’origine de la remontée de la flamme vers l’injecteur. Une étude plus approfondie serait nécessaire pour valider cette hypothèse.

Nous voyons ici l’importance cruciale du maillage sur les résultats. Il est ici nécessaire d’utiliser un maillage suffisamment raffiné de manière à ce que celui-ci puisse résoudre les structures turbulentes proches de l’injecteur. Nous avons de plus observé que la comparaison des pénétrations

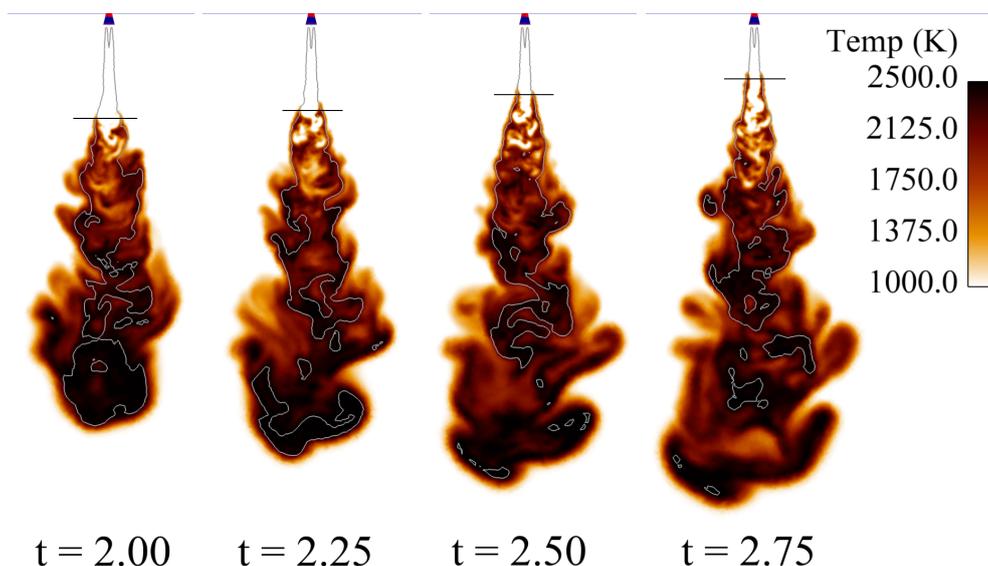


FIGURE 6.18 – Évolution du champ de température aux temps $t = 2,00$ ms, $t = 2,25$ ms, $t = 2,50$ ms et $t = 2,75$ ms pour le maillage A. La ligne gris clair représente une iso fraction de mélange à la stœchiométrie et la ligne noire horizontale représente le LOL.

gazeuses sur différents maillages n'était pas suffisante pour prouver une éventuelle convergence du maillage. Une comparaison des profils radiaux s'avère elle aussi nécessaire, et ce à différentes distances de l'injecteur.

Dans la suite de ces travaux, toutes les simulations seront réalisées sur le maillage B contenant 22.1 millions de cellules.

6.2.3 Influence du schéma cinétique

Le choix du schéma cinétique est particulièrement important puisqu'il conditionne tous les résultats obtenus avec le modèle de combustion. [Novella et al. \(2010\)](#) ont ainsi montré que l'utilisation de différents schémas cinétiques pouvait conduire à d'importantes différences en termes de délai d'auto-inflammation, de dégagement de chaleur et de LOL. Nous proposons ici de comparer trois schémas cinétiques dont les caractéristiques sont présentées dans le tableau 6.3.

Schéma cinétique	Nombre d'espèces	Nombre de réactions
Andrae (Andrae et al., 2008)	137	633
Seiser (Seiser et al., 2000)	160	770
Anderlohr (Anderlohr et al., 2009)	536	3000

TABLE 6.3 – Présentation des différents schémas cinétiques testés.



La figure 6.19 présente les taux de réaction obtenus pour les trois schémas cinétiques en fonction de \tilde{Z} et \tilde{c} . Ils ont été obtenus par la résolution d'une flamme de diffusion approchée calculée pour des configurations proches de celles observables pour le calcul du spray H : la pression est de 42.25 bar et la stratification en température est définie par $T_a = 900$ K et $T_f = 600$ K. Enfin l'étirement est fixé à 500 s^{-1} et la ségrégation en Z à 0.05.

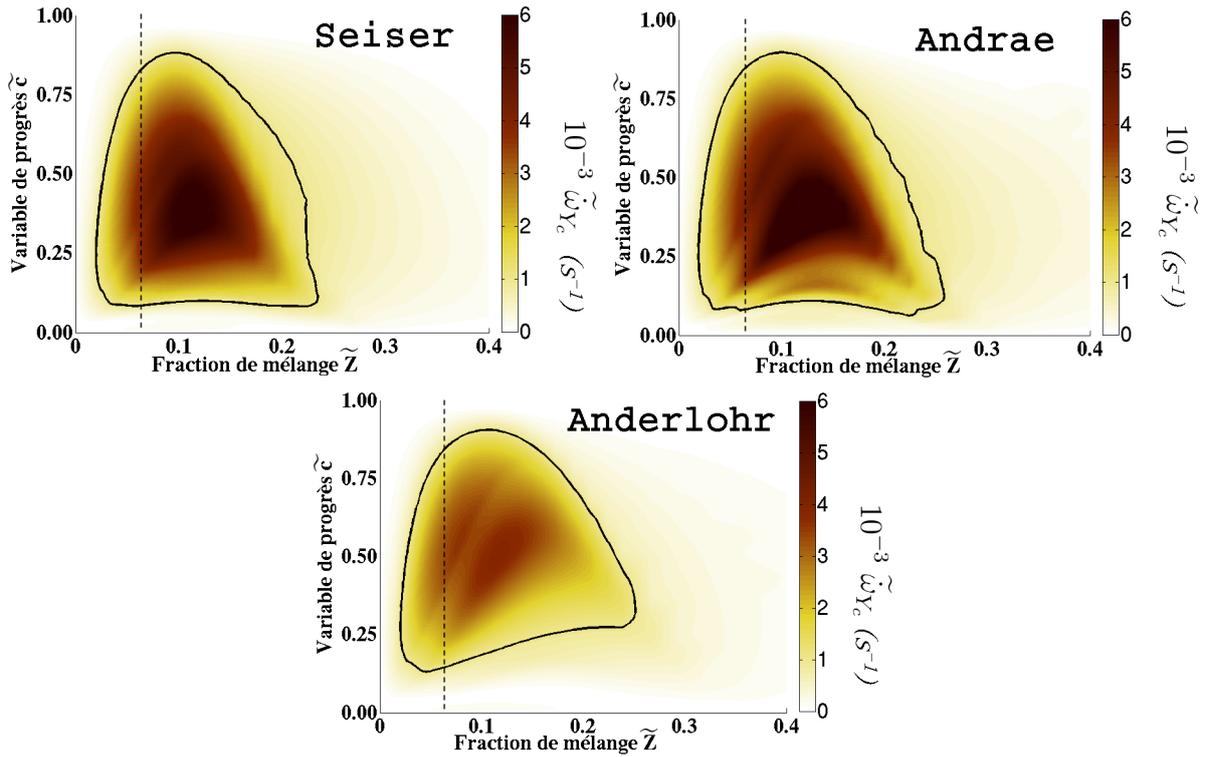


FIGURE 6.19 – Taux de réaction $\tilde{\omega}_{Y_c}(\tilde{c}, \tilde{Z}, S_z, \tilde{T}_a, \tilde{T}_f, a)$ en fonction de \tilde{Z} et \tilde{c} pour les trois mécanismes investigués pour une flamme de diffusion approchée dans la configuration suivante : $T_a = 900\text{K}$, $T_f = 600\text{K}$, $S_z = 0,05 \text{ s}^{-1}$ et $a = 500 \text{ s}^{-1}$. La ligne pointillée représente la fraction de mélange stœchiométrique. La ligne noire continue représente quant à elle une isoligne du taux de réaction à 1000 s^{-1} .

Les distributions des taux de réaction des schémas cinétiques d'Andrae et de Seiser sont très similaires. Les enveloppes des iso taux de réaction à 1000 s^{-1} sont elles aussi très proches. L'Anderlohr présente quant à lui une distribution différente des deux schémas précédents. Tout d'abord, les taux de réaction dans les zones les plus réactives sont plus faibles. De plus, l'enveloppe des iso taux de réaction est décalée pour des avancements plus importants, particulièrement pour les plus fortes richesses. Enfin, nous pouvons voir que les schémas cinétiques présentent des fluctuations du taux de réaction, et plus particulièrement celui de l'Andrae.

Ces comparaisons permettent de mettre en relief les différences concernant les taux de réaction les plus importants, jouant un rôle prépondérant dans l'obtention du LOL. Néanmoins, ceux-ci ne permettent pas de comparer les délais d'auto-inflammation, définis par les tout premiers taux

de réaction inférieurs de plusieurs ordres de grandeurs aux taux de réaction maximaux. Ainsi, la figure 6.19 nous présente ces délais pour atteindre des variables de progrès de 0.05 et 0.5. Les

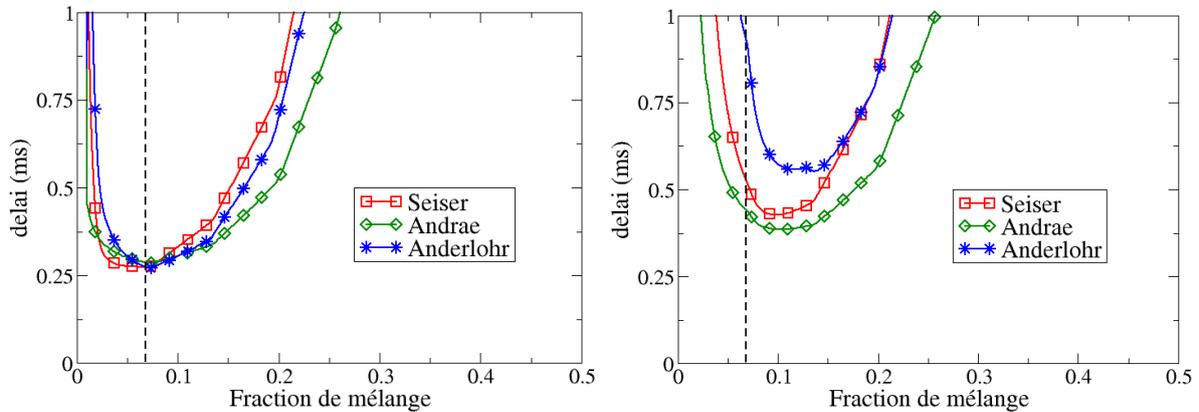


FIGURE 6.20 – Délais pour atteindre un avancement de $c = 0,05$ (à gauche) et $c = 0,5$ (à droite) pour les trois mécanismes cinétiques étudiés pour une flamme de diffusion approchée dans la configuration suivante : $T_a = 900\text{K}$, $T_f = 600\text{K}$, $S_z = 0,05 \text{ s}^{-1}$ et $a = 500 \text{ s}^{-1}$. La ligne pointillée représente la fraction de mélange stœchiométrique.

schémas cinétiques Andrae et Anderlohr prédisent un délai minimum d'environ 0.25 ms atteint au Z_{mr} situé pour des fractions de mélange proche de la stœchiométrie. Seul le mécanisme de Seiser prédit un Z_{mr} inférieur à la fraction de mélange à la stœchiométrie. Les différences de délai sont plus importantes pour les fractions de mélange plus riches. Le schéma cinétique d'Andrae prédit par exemple un délai significativement plus faible pour des fractions de mélange supérieures à 0.2. Les comparaisons pour une variable de progrès $c = 0.5$ montrent des différences bien plus importantes. Alors que le schéma cinétique d'Andrae prédit un avancement atteignant 0.5 au bout de 0.380 ms, le schéma cinétique d'Anderlohr est beaucoup plus lent, avec un délai de 0.552 ms. Les prédictions du Seiser présentent un compromis entre les deux schémas : elles sont proches de l'Andrae pour les faibles fractions de mélange et proches de l'Anderlohr pour les fractions de mélanges plus importantes.

Nous voyons ici que les schémas cinétiques prédisent une auto-inflammation assez similaire aux premiers instants de la combustion. Si l'on regarde la combustion de la flamme principale, les délais nécessaires pour atteindre un avancement de 0.5 sont cependant très différents entre les schémas cinétiques.

Nous comparons ensuite les prédictions obtenues par le modèle ADF-PCM avec ces trois schémas cinétiques sur la configuration du Spray H. Le cas sans EGR a ici été simulé avec le maillage de 22.1 millions de cellules. La figure 6.21 présente l'évolution de la variation de pression moyenne et du dégagement de chaleur.

Concernant l'augmentation de la pression moyenne, tous les schémas cinétiques prédisent les mêmes pentes à partir de 0,75 ms et les mêmes valeurs finales. Les différences se jouent lors de



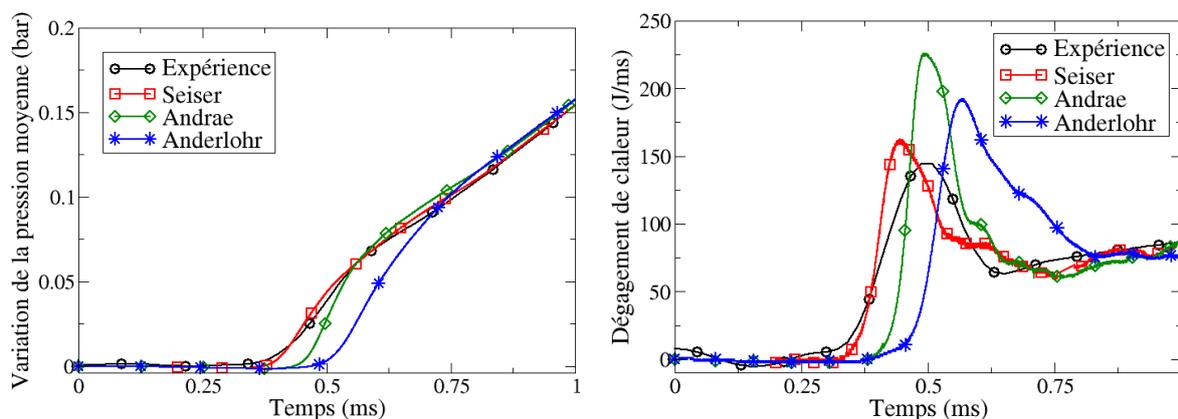


FIGURE 6.21 – Évolution temporelle de la pression (gauche) et du dégagement de chaleur (droite).

l'initiation de la combustion. Alors que le délai d'auto-inflammation est parfaitement prédit avec le mécanisme de Seiser, il est surestimé par les schémas d'Andrae et d'Anderlohr, comme nous le confirme la figure 6.22 présentant les LOL et les délais d'auto-inflammation obtenus par la LES pour les différents schémas cinétiques. Cette surestimation du délai va avoir une influence

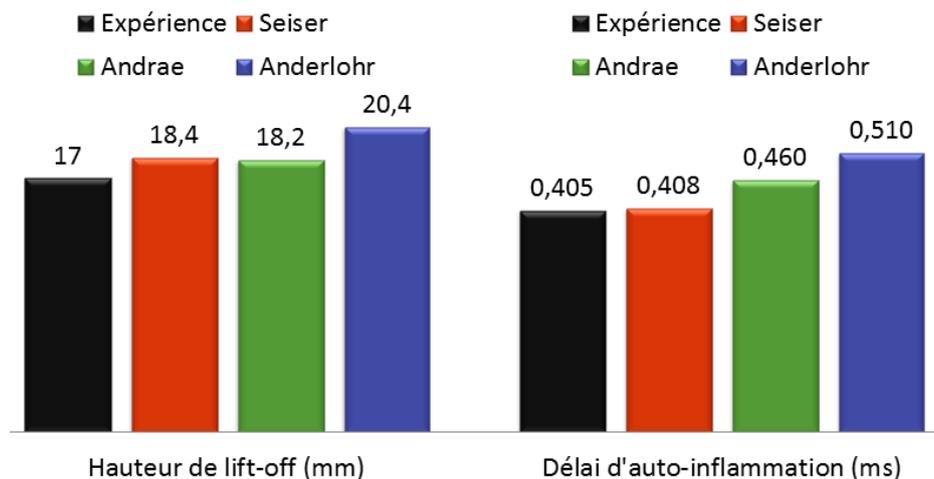


FIGURE 6.22 – Comparaison du LOL (à gauche) et du délai d'auto-inflammation (à droite) pour l'expérience et les schémas cinétiques Andrae, Seiser et Anderlohr.

sur le pic de dégagement de chaleur (Fig. 6.21) de la phase de prémélange. Plus le délai est long et plus une importante quantité de carburant va se mélanger à l'air, augmentant ainsi le pic de dégagement de chaleur de la phase de prémélange. Il est néanmoins à noter que le schéma d'Anderlohr prédit un pic de dégagement de chaleur plus faible que l'Andrae, dû à ses faibles taux de réaction (Fig. 6.19) limitant la vitesse de propagation de la combustion. Concernant le LOL présenté sur la figure 6.22, les LES utilisant les schémas Andrae et Seiser prédisent des résultats très similaires, surestimant légèrement le LOL expérimental. Le schéma cinétique d'Anderlohr, prédit quant à lui un LOL fortement surestimé. Ainsi, les deux schémas présentant des taux de

réaction maximaux semblables (Fig. 6.22) prédisent des LOL similaires alors que l’Anderlohr, présentant des taux de réaction inférieurs, prédit un LOL plus important.

Le LOL de la flamme semble donc être influencé par l’amplitude des taux de réaction : plus ceux-ci augmentent, plus le LOL est faible. Néanmoins, la prédiction du délai est plus complexe car elle tient compte des effets d’historique de la stratification en température ou de l’étirement. Ainsi, même si l’Andrae présente les délais les plus courts sur le cas laminaire, ce n’est pas le cas pour la simulation du Spray H. Les résultats obtenus s’avèrent donc particulièrement sensibles au schéma cinétique choisi. De plus, une analyse sur des cas unidimensionnels de différents schémas cinétiques ne permet pas nécessairement de déterminer leur comportement relatif dans des configurations complexes comme c’est le cas ici. Dans la suite de ces travaux, le schéma cinétique de Seiser sera utilisé.

6.2.4 Comparaisons entre les modèles THR, THR-PDF et ADF-PCM

L’étude conduite au chapitre 5 a montré l’importance de l’utilisation de fermetures pour la fluctuation de la fraction de mélange. Néanmoins, la précision des mesures de pression ainsi que l’absence de LOL, due à une injection courte, n’a pas permis de conclure quant à l’importance de la prise en compte de la structure de flamme de diffusion en sous-maille. La manipulation du Spray H présentant une injection plus longue, un LOL peut être défini. De plus, les mesures de la variation de pression ont été réalisées via un capteur dédié, permettant une précision accrue. Ce cas se prête donc bien à la comparaison entre les approches ADF-PCM et THR-PDF. Les résultats obtenus par l’approche THR sont aussi présentés, la stratification sous-maille de la fraction de mélange n’étant que rarement considérée dans les calculs Diesel (Jhavar and Rutland, 2006; Hu et al., 2008).

Dans un premier temps, la figure 6.23 présente les taux de réaction de la variable de progrès Y_c pour les approches ADF-PCM, THR-PDF et THR en fonction de \tilde{Z} et \tilde{c} pour des conditions proches de celles observables pour le calcul du Spray H : $T_a = 900$ K, $T_f = 600$ K et $p = 42.25$ bar. La ségrégation S_z est imposée à 0.05 et l’étirement à 500 s⁻¹.

Cette figure montre de fortes différences entre les taux de réaction des trois approches proposées, que ce soit en terme d’amplitude ou de localisation dans l’espace (\tilde{Z}, \tilde{c}) . Le modèle THR présente des taux de réaction maximaux très localisés à proximité de la fraction de mélange stœchiométrique. Leur amplitude est particulièrement importante, atteignant $80\,000$ s⁻¹. De plus nous pouvons voir que l’isoline indiquant un taux de réaction de Y_c de 1000 s⁻¹ est présente pour de faibles avancements lorsque la fraction de mélange est importante. Cela ne signifie pas nécessairement que le délai d’auto-inflammation prédit par ce modèle sera plus court. En effet, celui-ci est déterminé par les tout premiers taux de réaction aux faibles avancements. En comparaison les approches THR-PDF et ADF-PCM présentent des taux de réaction moins concentrés autour de la stœchiométrie et surtout beaucoup moins importants. Ainsi, l’approche ADF-PCM



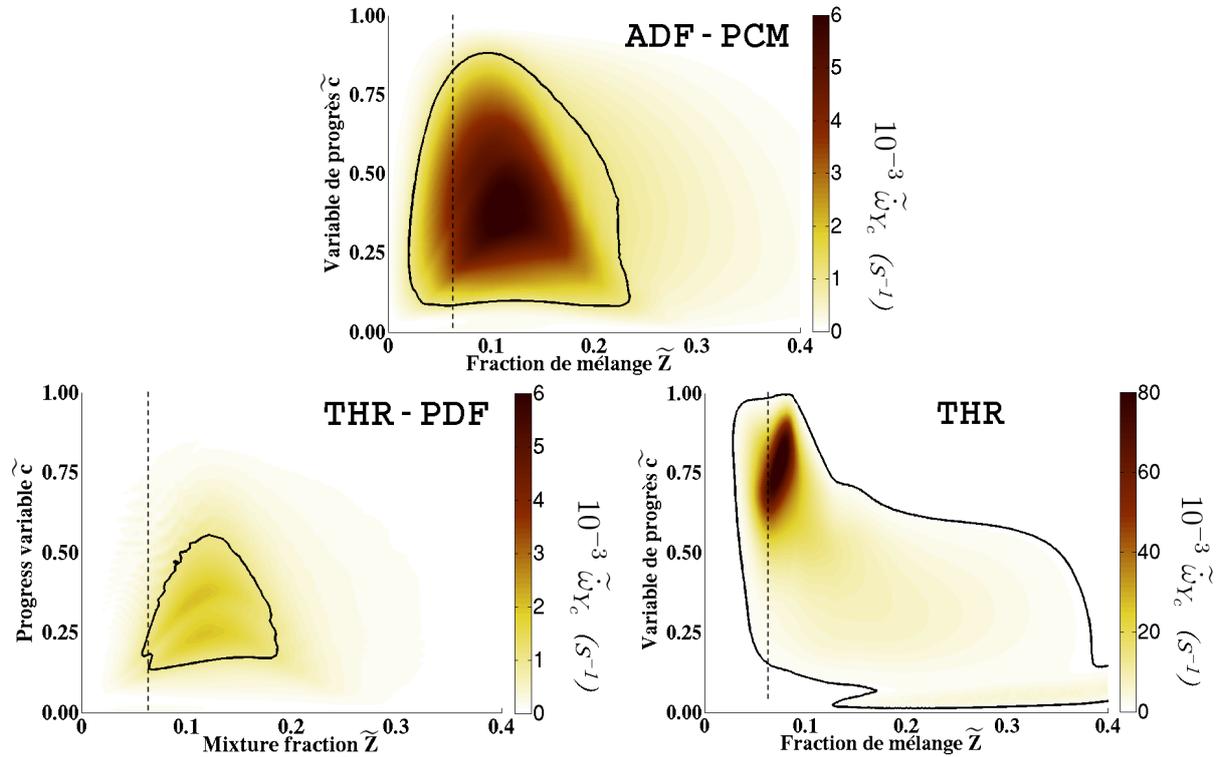


FIGURE 6.23 – Taux de réaction $\tilde{\omega}_{Y_c}$ pour les approches ADF-PCM (à gauche) THR-PDF (à droite) et THR (en bas) pour la configuration suivante : $T_a = 900\text{K}$, $T_f = 600\text{K}$, $p = 42,25$ bar, $S_z = 0,05$ (pour THR-PDF et ADF-PCM) et $a = 500 \text{ s}^{-1}$ (uniquement pour ADF-PCM). La ligne noire représente une isoligne de taux de réaction de 500 s^{-1} et la ligne pointillée la valeur de la fraction de mélange stœchiométrique.

prédit des taux de réaction maximaux de 6000 s^{-1} et l'approche THR-PDF de 2500 s^{-1} . Ces importantes différences avec l'approche THR proviennent de l'utilisation d'une fonction β permettant de décrire la stratification en sous-maille de la fraction de mélange. De la même façon, les taux de réaction maximaux sont moins localisés autour de la stœchiométrie pour les approches ADF-PCM et THR-PDF que pour l'approche THR puisque ceux-ci prennent en compte la contribution d'autres fractions de mélange que la fraction de mélange filtrée. D'importantes différences peuvent aussi être observées entre les approches THR-PDF et ADF-PCM. Les taux de réaction maximaux prédits par le modèle ADF-PCM sont environ trois fois plus importants que ceux de THR-PDF. Cela provient de l'intégration à iso-temps des taux de réaction pour les différentes fractions de mélange (Michel, 2008). Pour l'approche ADF-PCM, la prise en compte de la diffusion va provoquer une auto-inflammation très rapprochée en temps des différentes fractions de mélange. Le taux de réaction résultant de l'intégration à iso-temps sera donc relativement important du fait de l'auto-inflammation simultanée des différentes fractions de mélange. Pour l'approche THR-PDF, la diffusion n'étant pas prise en compte, le délai d'auto-inflammation diffère de façon importante entre les différentes fractions de mélange. L'intégration à iso-temps

prédira donc des taux de réaction faibles puisque seules quelques fractions de mélange présenteront simultanément des taux de réaction significatifs.

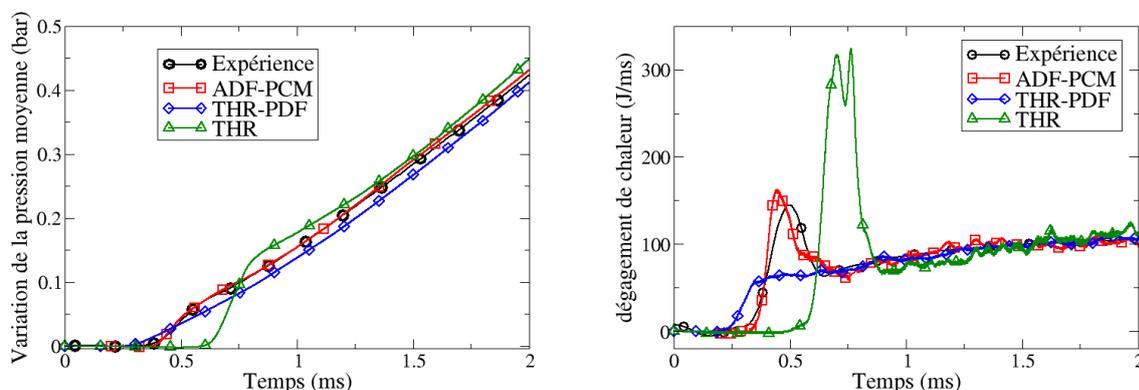


FIGURE 6.24 – Évolution temporelle de la variation de la pression moyenne (à gauche) et du dégagement de chaleur (à droite) pour la manipulation du spray H. Les modèles ADF-PCM, THR-PDF et THR sont comparés à l'expérience.

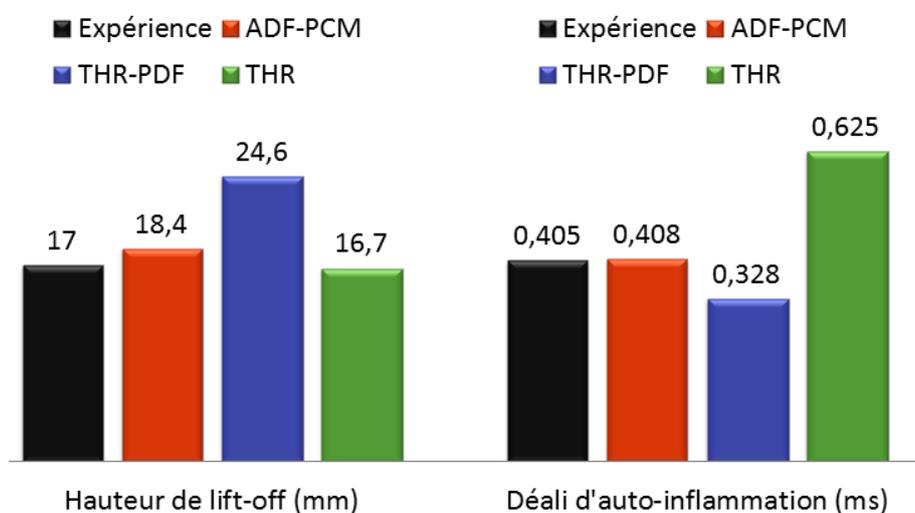


FIGURE 6.25 – Comparaison du LOL (à gauche) et du délai d'auto-inflammation (à droite) pour l'expérience et pour les approches ADF-PCM, THR-PDF et THR.

La figure 6.24 présente l'évolution temporelle de la variation de pression (à gauche) et du dégagement de chaleur (à droite) pour la manipulation du Spray H. Les résultats expérimentaux y sont comparés aux prédictions des modèles ADF-PCM, THR-PDF et THR. La figure 6.25 présente quant à elle les LOL et les délais d'auto-inflammation obtenus par l'expérience et la simulation avec les trois modèles cités précédemment. Comme nous l'avons déjà vu (Sect. 6.1), le modèle ADF-PCM reproduit précisément l'ensemble des résultats expérimentaux. Ce n'est cependant pas le cas des autres approches.



- L’approche THR-PDF prédit une élévation de pression légèrement trop précoce et sous-estimée. La sous-estimation de la variation de pression moyenne peut être expliquée par la courbe de dégagement de chaleur : le modèle THR-PDF se montre incapable de prédire le pic de combustion présent juste après l’auto-inflammation et résultant de la combustion dans un environnement partiellement prémélangé. Deux raisons peuvent expliquer l’absence du pic de prémélange. Tout d’abord, le modèle THR-PDF prédit des taux de réaction plus faibles que les autres modèles (Fig. 6.23). La propagation de la combustion dans la phase de prémélange sera donc plus lente. Ensuite, le délai d’auto-inflammation est sous-estimé (Fig. 6.25). La quantité de carburant ayant eu un temps suffisant pour se mélanger à l’air sera donc faible, limitant le pic de dégagement de chaleur. Les différences de délai entre les modèles ADF-PCM et THR-PDF proviennent probablement de la structure de flamme considérée par ces deux modèles. Le modèle ADF-PCM considère en effet une structure de flamme de diffusion à l’échelle du filtre. Il prend donc en compte les phénomènes diffusifs de sous-maille via l’étirement de la flamme de diffusion approchée. Dans les zones proches de l’injecteur, les forts étirements présents possèdent une influence significative sur le délai d’auto-inflammation. Ils vont l’augmenter par l’apport massif de gaz frais et la diffusion des produits dans les zones réactives. Dans les cas les plus critiques, l’étirement peut même dépasser l’étirement limite d’auto-inflammation, valeur au-delà de laquelle l’auto-inflammation d’une couche de mélange n’est plus possible. Enfin, le modèle THR-PDF surestime fortement le LOL (Fig. 6.25), probablement à cause de la faible amplitude des taux de réaction qu’elle prédit.
- La courbe de pression moyenne prédite par le modèle THR montre une élévation de pression tardive et brusque. Cela conduit à une surestimation de la pression moyenne à partir de 0.75 ms. Cela est confirmé par les courbes de dégagement de chaleur. L’approche THR prédit un dégagement de chaleur lors de la phase de prémélange tardif mais surtout fortement surestimé. Son amplitude est en effet deux fois plus importante que celle obtenue par l’expérience. Ici encore, deux raisons peuvent expliquer ce comportement. Tout d’abord, nous avons vu que les taux de réaction de l’approche THR étaient particulièrement importants (Fig. 6.23). Cela provient de l’hypothèse d’homogénéité de la fraction de mélange en sous-maille qui semble ici mise en défaut. La seconde raison provient de la forte surestimation du délai d’auto-inflammation (Fig. 6.25). Le temps disponible pour le mélange du carburant est ainsi plus important. Lors de l’auto-inflammation, une quantité plus importante de carburant est ainsi déjà mélangée avec l’air ambiant et, est consommée très rapidement. Cette surestimation du délai d’auto-inflammation provient de l’hypothèse d’homogénéité à l’échelle du filtre. Ainsi, ce modèle ne considère que la fraction de mélange filtrée pour déterminer le taux de réaction et donc le délai. Il ne prend pas en compte la contribution de toutes les autres fractions de mélange, y compris la contribution du Z_{mr} qui va avoir tendance à réduire le délai d’auto-inflammation. Par contre, le modèle THR prédit parfaitement le LOL

Au final, seul le modèle ADF-PCM prédit correctement l’ensemble des résultats expérimentaux, c’est-à-dire le délai d’auto-inflammation, le pic de dégagement de chaleur dans la phase de pré-

mélange, la phase de combustion diffusive et le LOL. Le modèle THR-PDF n'a pu reproduire correctement que la phase de combustion diffusive. Il a conduit à une sous-estimation du délai d'auto-inflammation et s'est montré incapable de prédire le pic de dégagement de chaleur lors de la phase de prémélange. Enfin la LES utilisant le modèle THR a présenté des résultats très différents de l'expérience, malgré une bonne prédiction du LOL. Elle a surestimé à la fois le délai d'auto-inflammation et le pic de dégagement de chaleur de la phase de prémélange.

Pour des maillages raffinés comme ceux que nous avons utilisés, la nécessité de l'utilisation d'une PDF pour décrire la stratification en sous-maille de la fraction de mélange ne semblait pas *a priori* évidente. En effet, la taille du filtre étant basée sur la taille caractéristique de la maille, le raffinement du maillage conditionne la part du mouvement turbulent résolu et donc l'importance du mélange en sous-maille. Cette section nous a permis de mettre en évidence la nécessité de la prise en compte de la stratification en sous-maille, même pour des maillages raffinés. De plus, d'importantes différences ont été remarquées entre les approches THR-PDF et ADF-PCM. Le modèle THR-PDF, qui ne considère pas une structure de flamme de diffusion en sous-maille, a été incapable de prédire le délai d'auto-inflammation ou encore le LOL. Malgré un maillage raffiné, la prise en compte de la structure de flamme en sous-maille s'est ici avérée nécessaire.



Chapitre 7

Conclusions et perspectives

7.1 Conclusions

Dans ces travaux de thèse, nous nous sommes intéressés à la simulation aux grandes échelles de la combustion dans les moteurs Diesel. Nous sommes partis du modèle de chimie tabulée ADF-PCM, précédemment développé pour des configurations non-prémélangées à pression constante dans un formalisme RANS. L'approche ADF à la base d'ADF-PCM permet d'approximer des flammes de diffusion laminaires à partir de l'équation de flammelettes de la variable de progrès Y_c dont le terme source provient de calculs de réacteurs homogènes.

Dans la première partie de ces travaux, l'approche ADF est présentée et ses capacités à reproduire la combustion d'une flamme laminaire non-prémélangée dans des conditions proches de celles d'un moteur Diesel sont évaluées. Les résultats de ce modèle ont été comparés à ceux d'une flammelette résolue avec un code dédié. Le modèle ADF a reproduit finement la structure de la flammelette et son délai d'auto-inflammation pour une large gamme d'étirements typiques des moteurs Diesel. Ces travaux ont aussi permis de mettre en défaut les hypothèses faites quant à la diffusion des espèces intermédiaires. L'importance croissante des phénomènes diffusifs avec l'étirement explique l'apparition de différences significatives, pour les plus forts étirements, entre les résultats obtenus pour la flammelette approchée et pour la flammelette résolue avec un code dédié.

Le modèle ADF-PCM a ensuite été étendu à un formalisme LES pour un écoulement diphasique. Les termes de couplage avec la phase liquide décrite par un formalisme Eulérien ont été introduits. Un modèle de stratification de température, inspiré de précédents travaux de [Jay et al. \(2009\)](#), a aussi été développé. Il permet de prendre en compte le caractère non-adiabatique de l'écoulement induit par les phénomènes d'évaporation et, en vue de futurs calculs moteurs, les variations de pression. Enfin, le calcul de l'étirement a été modifié de façon à prendre en compte à la fois les contributions résolues et les contributions de sous-maillages.



Dans un second temps, le modèle ADF-PCM a été appliqué à deux expériences de sprays liquides auto-inflammants en enceinte fermée. La première, réalisée à IFP Energies Nouvelles, consistait en l'injection très courte d'un carburant composé de 30% de α -méthyl-naphtalène et de 70% de n-décane. La seconde, dite du Spray H et réalisée à Sandia dans le contexte de l'ECN (Engine Combustion Network), se différenciait de la précédente par une phase d'injection longue de n-heptane et proposait des configurations avec différents taux d'EGR.

L'utilisation d'une approche mésoscopique Eulérienne pour décrire la phase liquide, couplée au modèle d'injection DITurBC, a montré une reproduction globalement satisfaisante des résultats expérimentaux sur les cas non-réactifs. Pour le spray à forte durée d'injection, il a été souligné la forte sensibilité des résultats au profil de coupure de l'introduction, ce dernier pilotant l'effet d'entraînement. Ce point est particulièrement problématique puisque la détermination expérimentale du temps de fermeture de l'injecteur est entachée d'importantes incertitudes. Le cône introduit au niveau de l'injecteur par la méthode DITurBC semble limiter l'effet d'entraînement dans les zones les plus proches de l'injecteur. Cette approche devra probablement être améliorée pour la prise en compte de l'entraînement d'air au voisinage de l'injecteur, et couplée à des prédictions précises des profils de taux d'introduction.

Les résultats obtenus par le modèle ADF-PCM ont ensuite été confrontés aux résultats expérimentaux et à ceux d'autres modèles de combustion également basés sur une chimie tabulée à partir de réacteurs homogènes. Ces modèles reposent sur différentes hypothèses simplificatrices concernant la structure de la zone de réaction et la stratification en sous-maille de la fraction de mélange. Les modèles de combustion ne prenant pas en compte la stratification en sous-maille de la fraction de mélange ont systématiquement surestimé les dégagements de chaleur lors de la phase de prémélange. Ce résultat souligne l'importance de la prise en compte des stratifications en sous-maille de la fraction de mélange et de la température associée, même pour les maillages raffinés utilisés dans cette étude. Seule l'expérience du Spray H a permis de mettre en avant la nécessité de prendre en compte à la fois la stratification de sous-maille et la structure de flamme de diffusion en sous-maille. En effet, sur ce cas, le modèle ne prenant en compte que la stratification de sous-maille a été incapable de prédire le pic de dégagement de chaleur dans la phase de prémélange et a surestimé la hauteur d'accrochage de la flamme. Des variations du taux d'EGR ont ensuite permis de montrer la capacité du modèle ADF-PCM à reproduire qualitativement son influence sur la combustion. Sans EGR, le modèle ADF-PCM reproduit de façon très précise les résultats expérimentaux. Sa précision s'est néanmoins dégradée à mesure que le taux d'EGR augmente. Cette dégradation a été principalement attribuée au schéma cinétique, non validé pour de forts taux d'EGR. Cependant, le déraffinement du maillage avec la distance à l'injecteur et la validité de l'approche des flammelettes pour de forts taux d'EGR pourraient aussi expliquer ces différences. Une étude approfondie quant à la contribution respective de ces hypothèses devra être conduite. Enfin, plusieurs schémas cinétiques de la littérature ont été testés et des différences significatives ont été observées, que ce soit pour le délai d'auto-inflammation, le dégagement de chaleur ou la hauteur d'accrochage de la flamme. Ces différences illustrent la grande

sensibilité des modèles de combustion à la prédiction de la chimie et l'importance cruciale du choix du schéma cinétique. Le manque de schémas cinétiques validés pour des conditions Diesel pour de larges gammes d'EGR en termes de délais d'auto-inflammation mais aussi d'étirements à l'extinction pourrait constituer un élément limitant à la prédictivité des modèles de combustion.

En conclusion, ces travaux constituent une étape importante vers la simulation aux grandes échelles de la combustion dans un moteur Diesel. Ils ont mené à une première estimation des maillages nécessaires en LES Diesel et ont permis de valider l'approche diphasique Eulérienne et le modèle DITurBC dans un contexte moteur. Le modèle ADF-PCM a été adapté à un formalisme diphasique LES. Celui-ci a été validé sur des configurations caractéristiques de la combustion Diesel et a montré de bonnes capacités prédictives. Des comparaisons entre différentes approches ont aussi mis en avant la nécessité de considérer à la fois la structure de flamme en sous-maille et la stratification de sous-maille de la fraction de mélange ainsi que celle de la température associée.

7.2 Axes de recherche pour l'approche ADF-PCM

Le modèle ADF-PCM a montré sa capacité à modéliser la combustion dans des conditions proches de celles d'un moteur Diesel. Néanmoins de nombreux travaux peuvent encore être réalisés pour l'améliorer et élargir son domaine de validité.

7.2.1 Prise en compte de l'étirement effectif

Dans ces travaux de thèse, nous avons considéré qu'une flamme de diffusion laminaire répondait de façon instantanée à une variation d'étirement. En réalité, celle-ci possède un temps de réponse de l'ordre de $1/a$ (Poinsot and Veynante, 2011). Ainsi, une flamme de diffusion n'est pas nécessairement soufflée par des étirements supérieurs à l'étirement à l'extinction si elle n'est soumise à ces étirements que pour des temps très courts. La flamme de diffusion se comporte comme un filtre passe-bas vis-à-vis de l'étirement (Darabiha, 1992) et ne répond donc pas aux hautes fréquences. Dans ce cadre, il serait intéressant de travailler avec un étirement effectif a_{eff} qui rend l'effet de temps de réponse de la flamme. Cela permettrait de continuer à utiliser des tabulations basées sur des flammes à étirement stationnaire, utilisant comme paramètre d'entrée cet étirement effectif. Une approche envisageable a été publiée par Haworth et al. (1988) et consiste en l'utilisation d'une équation de transport pour ce terme.



7.2.2 Description des phénomènes d'allumage et d'extinction en combustion non-prémélangée

En LES, l'étirement présente de fortes variations locales (spatiales et temporelles). Cela entraîne la nécessité de prendre à compte les effets d'extinction et de réallumage qu'elles peuvent entraîner. Dans le cas d'un spray Diesel sans EGR, les conditions thermodynamiques sont telles que les étirements limites sont extrêmement importants et ne peuvent être atteints qu'à quelques millimètres de l'injecteur. La hauteur d'accrochage de la flamme étant bien plus importante, celle-ci ne peut être soufflée. Avec l'ajout d'EGR, la réactivité du mélange et donc la valeur de l'étirement à l'extinction diminue. Néanmoins, la hauteur d'accrochage de la flamme augmente avec le taux d'EGR et la combustion se situe ainsi dans des zones pour lesquelles les étirements sont plus faibles. Pour ces raisons, les phénomènes d'extinction et de réallumage n'ont pas été pris en compte dans ces travaux. Néanmoins dans le cas de moteurs Diesel, la combustion peut se produire dans des zones proches des parois (typiquement le long du bol) présentant à la fois un fort étirement et de faibles températures. Dans ces cas, la nécessité de décrire les phénomènes d'extinction et de réallumage devra être étudiée.

7.3 Vers le calcul moteur

La perspective des présents travaux est la réalisation de LES de moteurs Diesel. A cet effet, l'approche présentée devra être étendue pour inclure certains phénomènes, décrits dans ce qui suit.

7.3.1 Problèmes de la taille des tables

La taille des tables est une problématique récurrente lors de l'utilisation de modèles de combustion tabulée. A titre d'exemple, la table utilisée pour le spray H est composée de 1.7 millions de points contenant chacun 6 espèces et le taux de réaction de Y_c . Cette table contient donc 11.9 millions de données, occupant au final 95 Mo d'espace mémoire en double précision. La réalisation d'une table ADF-PCM adaptée à une configuration moteur nécessite au minimum deux dimensions supplémentaires : la pression et les EGR. En admettant qu'une discrétisation de la pression en 6 points et des EGR en 4 points soit suffisante, nous obtenons une table occupant 2,3 Go de mémoire sur les 4 Go disponibles sur chacun des nœuds du supercalculateur utilisé lors de ces travaux de thèse. Dans ces conditions, le raffinement de la table devient particulièrement problématique. De plus d'autres paramètres d'entrée peuvent être nécessaires de façon à prendre en compte tous les paramètres physiques présents dans le cas étudié (Jay and Colin, 2011; Fiorina et al., 2003).

La première façon de réduire la mémoire occupée par la table consiste à stocker les données non

pas en double mais en simple précision. Cette approche doit être la première à être mise en place car elle est très simple et réduit de moitié la taille de la table pour une perte d'informations extrêmement limitée. Si cette simple diminution de précision reste insuffisante, des méthodes plus complexes peuvent être envisagées. Ainsi la méthode S2FT (Self-Similarity Flame Tabulation) (Ribert et al., 2006, 2012) exploite le comportement auto-similaire des profils de taux de réaction des espèces, ce qui permet de réduire le nombre de paramètres d'entrée. Cette approche permet une réduction de la taille d'une table allant jusqu'à plusieurs ordres de grandeur. Une autre méthode permettant de réduire de façon importante la taille des tables consiste à utiliser des réseaux de neurones artificiels (Ihme et al., 2007, 2009). L'objectif est de faire *apprendre* une table à un réseau de neurones. Ainsi, lors du calcul CFD, le réseau de neurones, consistant en des relations analytiques, se substituera à la base de données. Les problèmes de taille sont donc ici complètement résolus. Les avantages de cette méthode sont contrebalancés par le temps d'apprentissage du réseau de neurones, qui peut être particulièrement long, augmentant d'autant le processus global de génération de la base de données chimique. L'incertitude quant à la convergence du réseau de neurones et les problèmes d'*overfitting* sont eux aussi limitants.

7.3.2 Modélisation prédictive de l'injection liquide et de l'écoulement à proximité de l'injecteur.

Dans les présents travaux, un formalisme Eulérien couplé au modèle d'injection DITurBC (Martinez et al., 2010) ont été utilisés. Ceux-ci ont montré une bonne capacité à prédire la dynamique du liquide et le mélange gazeux résultant lors de la phase d'injection du liquide. Néanmoins, lors de la coupure de l'injection, le cône introduit par le modèle DITurBC tend à réduire l'effet d'entraînement. Cela entraîne l'apparition d'une zone riche en carburant à proximité du plan d'injection comme nous l'avons vu dans le chapitre 5 (Fig.5.22). Il est possible de compenser l'effet du cône introduit par le modèle DITurBC en réduisant le temps de fermeture de l'injecteur. La prédiction de ces phases de coupure et de l'écoulement à proximité de l'injecteur est donc rendu difficile par le modèle utilisé mais aussi par les incertitudes expérimentales lors des phases d'ouverture et de fermeture de l'injecteur.

L'utilisation d'une approche permettant la description fine de l'écoulement à proximité de l'injecteur, que ce soit dans un formalisme Eulérien ou Lagrangien, pourrait probablement améliorer les prédictions. Néanmoins celle-ci risque de se heurter à des problématiques de temps de calcul trop importants pour des applications pratiques. Une autre consisterait à ne pas imposer une vitesse nulle sur le cône DITurBC lors de la coupure de l'injection de façon à reproduire le mouvement d'entraînement. Ces profils de vitesse devraient être extraits de simulations détaillées d'injections liquides (Lebas et al., 2009).



7.3.3 Évolution de l'équilibre CO / CO_2 la détente

Lors de la phase de détente, l'évolution de l'équilibre CO / CO_2 est essentielle à prendre en compte pour une prédiction adéquate de la température, d'autant plus que le CO fait partie des polluants considérés dans les normes européennes. L'utilisation d'approches basées sur la tabulation de réacteurs homogènes pour prédire l'évolution de cet équilibre dans la phase de détente n'est pas adaptée. En effet, ces approches ne peuvent pas prendre en compte les pertes d'enthalpie ou d'énergie liées au travail des forces de pression durant la phase de détente. De plus, lors de la phase de détente, la baisse de la température (typiquement en dessous de 1700K (Heywood, 1988)) provoque un ralentissement voire un figeage des réactions entre ces deux espèces. Ces phénomènes ne peuvent pas être pris en compte par des réacteurs homogènes à pression constante puisqu'ils ne représentent pas ces conditions de détente. Enfin, l'utilisation d'une variable d'avancement basée sur les espèces CO et CO_2 , dont les concentrations peuvent être figées dans la détente, n'est pas adaptée.

Pour ces raisons, le modèle VVTHC (Variable Volume Tabulated Homogeneous Chemistry) (Jay and Colin, 2011) a été développé. Il est basé sur la tabulation de réacteurs homogènes à volume variable. Ces derniers peuvent naturellement prendre en compte les effets de la détente. Dans la pratique, ce modèle s'avère complexe à mettre en œuvre et les temps de génération des tables et leurs tailles peuvent devenir problématiques.

Le modèle CORA (CO Relaxation Approach) (Bougrine et al., 2012) développé pour des approches 0D permet la prédiction de l'équilibre CO / CO_2 . Il considère une relaxation linéaire de l'espèce CO vers sa valeur d'équilibre en un temps τ . Le temps de relaxation et la valeur d'équilibre de la fraction massique de CO sont tabulés pour différentes conditions initiales. Il s'agira de valider si une telle approche est suffisante pour un contexte LES.

7.3.4 Prédiction de la formation de NO_x et de suies

Un autre aspect du modèle de combustion qu'il sera important de développer dans de futurs travaux est la capacité à prédire la formation des polluants et leur évolution dans la chambre. Pour un moteur Diesel, les polluants principaux sont les NO_x et les suies.

En ce qui concerne le NO_x , les modèles se concentrent généralement sur la prédiction du NO qui est le composant majoritaire. L'utilisation d'une approche de tabulation pour prédire la formation de NO ne permet pas une représentation précise de son historique. En effet, le temps de formation du NO est long comparé à celui de l'oxydation du carburant. Le NO est formé et détruit pour une variable d'avancement très proche de 1, entraînant des erreurs de prédiction. De façon à contourner ce problème, Godel et al. (2008) ont défini une nouvelle variable d'avancement caractérisant à la fois la combustion et la formation de NO . Des méthodes de relaxation peuvent aussi être utilisées. Ainsi, Michel (2008) a utilisé ce type d'approche pour prédire la fraction

massique de NO . Le modèle NORA (NO Relaxation Approach) (Vervisch et al., 2011) a étendu ces travaux à des cas non-adiabatiques à pression variable et a été appliqué à des calculs RANS de moteurs Diesel. Les prédictions de NO par la simulation RANS ont montré un bon accord avec les résultats expérimentaux.

Les niveaux de suies présents à l'échappement sont le résultat de la compétition des phénomènes de production et d'oxydation, et donc des évolutions temporelles et spatiales des niveaux locaux de température et de richesse. Ceux-ci étant décrits par la LES, ce formalisme pourrait permettre d'accroître la qualité des prédictions des modèles de suies. De plus, la LES permet de prédire les variations locales du mélange d'un cycle à un autre. L'application d'un modèle de suies dans un formalisme LES pourrait permettre l'étude et la caractérisation de variations cycliques d'émissions de suies. Les modèles actuellement utilisés dans les calculs de moteurs Diesel sont des approches empiriques voire semi-empiriques permettant uniquement de déterminer la quantité globale de suies. De façon à répondre à l'évolution des normes liées aux émissions polluantes, l'utilisation d'approches sectionnelles (Netzell, 2006; Vervisch, 2012) ou de moments (Mauss, 1998) permettant de décrire la répartition en taille des particules de suies devra être envisagée. L'utilisation de ces méthodes couplées à un modèle de chimie tabulée requiert l'introduction dans la tabulation de nouvelles espèces nécessaires au modèle de suies. Ces espèces devront être prédites avec précision dans la phase de détente où se forment les suies.



Bibliographie

- ADEME (2012). Agence de l'Environnement et de la Maîtrise de l'Energie. 19
- Anderlohr, J. M., Bounaceur, R., da Cruz, A. P., and Battin-Leclerc, F. (2009). Modeling of autoignition and NO sensitization for the oxidation of IC engine surrogate fuels. *Combustion and Flame*, 156(2) :505–521. 67, 145
- Andrae, J., Brinck, T., and Kalghatgi, G. (2008). HCCI experiments with toluene reference fuels modeled by a semi-detailed chemical kinetic model. *Combustion and Flame*, 155 :696 – 712. 145
- Andrews, M. J. and O'Rourke, P. J. (1996). The multiphase Particle-in-cell (MP-PIC) method for dense particulate flows . *International Journal of Multiphase Flow*, 22(2) :379–402. 59
- Auto Innovation (2012). www.auto-innovations.com. 23
- Auzillon, P., Gicquel, O., Darabiha, N., Veynante, D., and Fiorina, B. (2012). A Filtered Tabulated Chemistry model for LES of stratified flames. *Combustion and Flame*, 159 :2704 – 2717. 34
- AVBP (2008). Handbook AVBP. Technical report. 57
- Azimov, U., Kim, K. S., and Bae, C. (2010). Modeling of flame lift-off length in Diesel low-temperature combustion with multi-dimensional CFD based on the flame surface density and extinction concepts. *Combustion Theory and Modelling*, 14 :155 – 175. 42, 122, 138
- Barths, H., Antoni, C., and Peters, N. (1998). Three-Dimensional Simulation of Pollutant Formation in a DI Diesel Engine Using Multiple Interactive Flamelets. *SAE paper*, 982459. 33
- Barths, H., Hasse, C., and Peters, N. (2000). Computational fluid dynamics modelling of non-premixed combustion in direct injection diesel engines. *International Journal of Engine Research*, 1(3) :249–267. 33, 37
- Barths, H., Pitsch, H., and Peters, N. (1999). Three-dimensional simulation of DI Diesel combustion and pollutant formation using a two-component reference fuel. *Oil & Gas Science and Technology*, 54(2) :233–244. 33, 81



- Beard, P. and Mokaddem, K. (1998). Modélisation de la combustion Diesel - Evaluation du calcul de l'aérodynamique. Technical Report 44502. 38
- Bekdemir, C., Rijk, E., Somers, L., de Goey, L., and Albrecht, B. (2010). On the application of the flamelet generated manifold (FGM) approach to the simulation of an igniting Diesel spray. *SAE paper 2010-01-0358*. 123
- Bekdemir, C., Somers, L., de Goey, L., Tillou, J., and Angelberger, C. (2012). Predicting Diesel combustion characteristics with Large-Eddy Simulations including tabulated chemical kinetics. *Accepted to Proceedings of the Combustion Institute*. 35, 42, 123, 133, 138
- Bilger, R. W. (1993). Conditional moment closure for turbulent reacting flow. *Physics of Fluids*, 5 :437. 32
- Boelle, A., Balzer, G., and Simonin, O. (1995). Second order Prediction of the Part-Phase Stress Tensor of Inelastic Spheres in Simple Shear Dense Suspensions. In *ASME Gas-Solid Flows Symposium*. 51, 55, 56
- Bougrine, S., Richard, S., Michel, J.-B., and Veynante, B. (2012). Simulation of CO and NO emissions in a SI engine using a 0D coherent flame model coupled with a tabulated chemistry approach. *Submitted to Combustion and flame*. 21, 160
- Bruneaux, G. (2008). Study of the Effect of Wall Guiding on Direct Diesel Injection by Optical Diagnostics. In *The Seventh International Conference on Modeling and Diagnostics for Advanced Engine Systems (COMODIA)*, pages 585 – 592. 79, 83, 95, 112
- Bruneaux, G. and Maligne, D. (2009). Study of the mixing and Combustion Processes of Consecutive Short Double Diesel Injections. *SAE paper*. 95
- Bykov, V. and Pope, S. (2007). The extension of the ILDM concept to reaction-diffusion manifolds. *Combustion Theory and Modelling*, 11 :839–862. 33
- Campbell, C. (1989). The stress tensor for simple shear flows of a granular material. *Journal of Fluid Mechanics*, 203 :449–473. 55
- Caulfield, S., Rubenstein, B., Martin, J., Ruppel, P., Meyer, M., Lewis, S., Tang, A., and Tillock, B. (1999). A comparison between CFD predictions and measurements of inlet port discharge coefficient and flow characteristics. *SAE paper 1999-01-3339*. 38
- Chapman, S. and Cowling, T. (1939). *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge University Press, cambridge mathematical library edition. 52, 55
- Chassaing, P. (2000). *Turbulence en mécanique des fluides*. CEPADUES Editions. 48
- Chen, J. (2011). Petascale direct numerical simulation of turbulent combustion - fundamental insights towards predictive models. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :99 – 123. 21

- Colin, O. and Benkenida, A. (2004). The 3-Zones Extended Coherent Flame Model (ECFM3Z) for computing premixed/diffusion combustion. *Oil & Gas Science and Technology*, 59(6) :593–609. 122, 126
- Colin, O., Benkenida, A., and Angelberger, C. (2003). 3D Modelling of Mixing, Ignition and Combustion Phenomena in Highly Stratified Gasoline Engines. *Oil & Gas Science and Technology*, 58(1) :47–62. 37
- Colin, O., da Cruz, A. P., and Jay, S. (2005). Detailed chemistry-based auto-ignition model including low temperature phenomena applied to 3-D engine calculations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :2649–2656. 37
- Cosilab (2010). *Rotexo Software, Bochum*. 61, 66
- da Cruz, A. P., Baritaud, T., and Poinso, T. (2001). Self-ignition and combustion modeling of initially non premixed turbulent systems. *Combustion and Flame*, 124(1-2) :65–81. 39, 82
- da Cruz, A. P., Jay, S., and Colin, O. (2004). Modélisation de la combustion essence. Technical Report 57976, IFP. 37
- Darabiha, N. (1992). Transient behavior of laminar counterflow Hydrogen-Air diffusion flames with complex chemistry. *Combustion Science and Technology*, 86 :163–181. 157
- De Paola, G., Mastorakos, E., Wright, Y., and Boulouchos, K. (2008). Diesel engine simulations with multi-dimensional conditional moment closure. *Combustion Science and Technology*, 180 :883–899. 22, 33, 80
- Domingo, P., Vervisch, L., and Veynante, D. (2008). Large-Eddy Simulation of a lifted methane jet flame in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, 152 :415 – 432. 34, 90
- Drake, M. and Haworth, D. (2007). Advanced gasoline engine development using optical diagnostic and numerical modeling. *Proceedings of the 31st Symposium (Int.) on Combustion, The Combustion Institute*. 21
- ECN (2012). Sandia national laboratories, Engine Combustion Network. <http://www.sandia.gov/ecn>. 42, 123, 129, 136
- Felsch, C., Gauding, M., Hasse, C., Vogel, S., and Peters, N. (2009). An extended flamelet model for multiple injections in DI Diesel engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :2775–2783. 81
- Fevrier, P., Simonin, O., and Squires, K. (2005). Partitioning of Particle Velocities in Gas-Solid Turbulent Flows into a Continuous Field and a Spatially Uncorrelated Random Distribution : Theoretical Formalism and Numerical Study. *Journal of Fluid Mechanics*, 533 :1–46. 50, 52, 84, 131



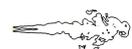
- Fiorina, B., Baron, R., Gicquel, O., Thevenin, D., Carpentier, S., and Darabiha, N. (2003). Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ILDM. *Combustion Theory and Modelling*, 7 :449–470. 34, 65, 124, 158
- Fiorina, G., Gicquel, O., and Veynante, D. (2009). Turbulent flame simulation taking advantage of tabulated chemistry self-similar properties. In *Proceedings of the Combustion Institute*, volume 32, pages 1687–1694. 35
- Galpin, J. (2007). *Modélisation LES de la combustion avec une prise en compte des effets de la cinétique détaillée et en perspective d'applications moteurs*. PhD thesis, INSA ROUEN. 27
- Galpin, J., Angelberger, C., Naudin, A., and Vervisch, L. (2008). Large-Eddy Simulation of H_2 -air auto-ignition using tabulated chemistry. *Journal of Turbulence*, 9 :1–21. 34, 88
- Gicquel, O., Darabiha, N., and Thevenin, D. (2000). Laminar premixed hydrogen/air counterflow flame simulations using flame prolongation of ILDM with differential diffusion. *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 :1901 – 1908. 34, 87
- Giovangigli, V. (1999). *Multicomponent flow modeling*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA. 86
- Godel, G., Domingo, P., and Vervisch, L. (2008). Tabulation of NOx chemistry for Large-Eddy Simulation of non-premixed turbulent flames. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :1555 – 1561. 160
- Gopalakrishnan, V. and Abrahams, J. (2002). An investigation of ignition behaviour in Diesel sprays. *Proceedings of the Combustion Institute*, 29 :641 – 646. 42, 122, 125
- Gordona, R., Masria, A., Pope, S., and Goldinc, G. (2007). Transport budgets in turbulent lifted flames of methane autoigniting in a vitiated co-flow. *Combustion and Flame*, 151 :495 – 511. 36
- Halstead, M., Kirsch, J., Prothero, A., and Quinn, C. (1977). The auto-ignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures - Fitting of a mathematical model. *Combustion and Flame*, 30 :45–60. 39, 82
- Haworth, D. (2010). Progress in probability density functions methods for turbulent reacting flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 36 :168 – 259. 32
- Haworth, D., Drake, M., and Blint, R. (1988). Stretched laminar flamelet modeling of a turbulent jet diffusion flame. *Combustion Science and Technology*, 60 :287–318. 157
- Heywood, J. B. (1988). *Internal Combustion Engine Fundamentals*. McGraw-Hill series in mechanical engineering. 160
- Hirschfelder, J., Curtiss, C., and Byrd, R. (1969). *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York. 49, 86

- Hopkins, M. and Louge, M. (1991). Inelastic Microstructure in Rapid Granular Flows of Smooth Disks. *Phys. of Fluids*, 3 :47–57. 55
- Hu, B., Musculus, M. P. B., and Oefelein, J. C. (2010a). Large Eddy Simulation of a Transient Air Jet with Emphasis on Entrainment during Deceleration. *SAE paper 2010-01-1133*. 116
- Hu, B., Rutland, C., and Shethaji, T. A. (2008). Combustion Modeling of Conventional Diesel-type and HCCI-type Diesel Combustion with Large Eddy Simulation. *SAE Paper 2008-01-0958*. 39, 82, 123, 149
- Hu, B., Rutland, C., and Shethaji, T. A. (2010b). A Mixed-Mode Combustion Model for Large-Eddy Simulation of Diesel Engines. *Combustion Science and Technology*, 182 :1279–1320. 82
- Idicheria, C. and Pickett, L. (2007a). Effect of EGR on Diesel premixed burn equivalence ratios. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 :2931 – 2938. 42, 109, 122, 134, 138, 141
- Idicheria, C. and Pickett, L. (2007b). Quantitative Mixing Measurements in a Vaporizing Diesel Spray by Rayleigh Imaging. *SAE paper 2007-01-0647*. 129
- Ihme, M., Cha, C. M., and Pitsch, H. (2005). Prediction of local extinction and re-ignition effects in non-premixed turbulent combustion using a flamelet/progress variable approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :793 – 800. 36, 81
- Ihme, M., Marsden, A. L., and Pitsch, H. (2007). Generation of optimal artificial neural networks using a pattern search algorithm : Application to approximation of chemical systems. *Neural Computation*, 20 :573 – 601. 159
- Ihme, M., Schmitt, C., and Pitsch, H. (2009). Optimal artificial neural networks and tabulation methods for chemistry representation in LES of a bluff-body swirl-stabilized flame. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32 :1527 – 1535. 159
- Ihme, M. and See, Y. C. (2010). Prediction of auto-ignition in a lifted methane/air flame using an unsteady flamelet/progress variable model. *Combustion and Flame*, 157 :1850 – 1862. 36
- Inagaki, M., Nagaoka, M., Horinouchi, N., and Suga, K. (2010). Large-Eddy Simulation analysis of engine steady intake flows using a mixed-time-scale subgrid-scale model. *International Journal of Engine Research*, 11 :229 – 241. 38
- James, S., Zhu, J., and Anand, M. (2007). LES of turbulent flames using the filtered density function model. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(1737-1745). 36
- Jay, S., Béard, P., and da Cruz, A. P. (2007a). Modeling coupled processes of CO and soot formation and oxidation for conventional and HCCI Diesel combustion. *SAE Paper*, 2007-01-0162. 37



- Jay, S. and Colin, C. (2011). A variable volume approach of tabulated detailed chemistry and its applications to multidimensional engine simulations. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33 :3065 – 3072. 22, 35, 37, 89, 128, 158, 160
- Jay, S., Knop, V., and Colin, O. (2009). Améliorations du modèle TKI, Modélisation ECFM-FPI Compression-Détente. Technical report, IFP Energies Nouvelles. 155
- Jay, S., Pera, C., and Colin, O. (2007b). Tabulation de polluants par la méthode FPI et de l'étude GSM DC1 2006 - FPI-moteur. Technical Report 59766, IFP. 180
- Jhavar, R. and Rutland, C. J. (2006). Using Large Eddy Simulations to Study Mixing Effects in Early Injection Diesel Engine Combustion. *SAE Paper 2006-01-0871*. 32, 39, 81, 82, 149
- Joelsson, T., Yu, R., Bai, X. S., Vressner, A., and Johansson, B. (2008). Large-Eddy Simulation and Experiments of the Auto-Ignition Process of Lean Ethanol/Air Mixture in HCCI Engines. *SAE paper 2008-01-1668*. 41
- Juddoo, M., Masri, A., and Pope, S. (2011). Turbulent piloted partially-premixed flames with varying levels of O-2/N-2 : stability limits and PDF calculations. *Combustion Theory and Modelling*, 15 :773 – 793. 32
- Kaufmann, A. (2004). *Vers la simulation des grandes échelles en formulation Euler-Euler des écoulements réactifs diphasiques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 53
- Klimenko, A. and Bilger, R. (1999). Conditional moment closure for turbulent combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 25(6) :595 – 687. cited By (since 1996) 291. 40, 81
- Klimenko, A. Y. (1990). Multicomponent diffusion of various admixtures in turbulent flow. *Fluid Dynamics*, 25(3) :327 – 334. 32
- Kong, S., Han, Z., and Reitz, R. (1995). The Development and Application of a Diesel Ignition and Combustion Model for Multidimensional Engine Simulations. *SAE paper 950278*. 39, 82
- Kraichnan, R. (1970). Diffusion by a Random Velocity Field. *Physics of Fluids*, 13 :22–31. 96
- Lax, P. D. and Wendroff, B. (1960). Systems of conservation laws. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 13 :217–237. 96, 130
- Lebas, R., Menard, T., Beau, P., Berlemont, A., and Demoulin, F. (2009). Numerical simulation of primary break-up and atomization : DNS and modelling study. *International Journal of Multiphase Flow*, 35(3) :247 – 260. 159
- Lecocq, G., Richard, S., Colin, O., and Vervisch, L. (2011). Hybrid presumed pdf and flame surface density approaches for Large-Eddy Simulation of premixed turbulent combustion : Part 1 : Formalism and simulation of a quasi-steady burner. *Combustion and Flame*, 158(6) :1201 – 1214. 34

- Lee, D., Pomraning, E., and Rutland, C. J. (2002). LES Modelling of Diesel Engines. *SAE paper 2002-01-2779*. 39, 82
- Lee, S. G., Joo, B. C., Kim, K. C., and Rho, B. J. (2000). Influence of ALR on Disintegration Characteristics in Pneumatic Spray. *International Journal of Automotive Technology*, 1(2) :95–100. 39, 82
- Lee, Y. and Huh, K. (2012). Simulation of spray development and turbulent combustion processes in low and high speed diesel engines by the CMC-ISR model. *Combustion Theory and Modelling*, 16 :13 – 30. 33
- Lehtiniemi, H., Mauss, F., Balthasar, M., and Magnusson, I. (2006). Modeling Diesel spray ignition using detailed chemistry and with a progress variable approach. *Combustion Science and Technology*, 178 :1977–1997. 22, 36, 37, 81
- Lesieur, M. and Metais, O. (1996). New trends in Large-Eddy Simulations of turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 28 :45 – 82. 48
- Li, Y. and Kong, S.-C. (2008). Diesel combustion modelling using les turbulence model with detailed chemistry. *Combustion Theory and Modelling*, 12 :205–219. 40, 80, 81
- Lilly, D. (1967). The representation of small-scale turbulence in numerical simulation experiments. In *Proceedings of the IBM Scientific Computing Symposium on Environmental Sciences*, Yorktown Heights, USA. 100
- Lipp, S. and Maas, U. (2008). Simulations of premixed swirling flames using a hybrid finite-volume/transported PDF approach. *High Performance Computing in Science and Engineering*, pages 215 – 227. 34
- Liu, K. and Haworth, D. (2010). Large-Eddy Simulation for an Axisymmetric Piston-Cylinder Assembly With and Without Swirl. *Flow, Turbulence and Combustion*, 85 :279 – 307. 38
- Liu, S., Hewson, J., Chen, J., and Pitsch, H. (2004). Effects of strain rate on high-pressure nonpremixed n-heptane autoignition in counterflow. *Combustion and Flame*, 137 :320 – 339. 67
- Lun, C. and Savage, S. B. (1986). The effects of an impact velocity dependent coefficient of restitution on stresses developed by sheared granular materials. *Acta Mechanica*, 63 :15–44. 55
- Maas, U. and Pope, S. B. (1992). Simplifying chemical kinetics : intrinsic low-dimensional manifolds in composition space. *Combustion and Flame*, 88 :239–264. 33
- Martinez, L. (2009). *Simulation aux grandes échelles de l'injection de carburant liquide dans les moteurs à combustion interne*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 27



- Martinez, L., Benkenida, A., and Cuenot, B. (2010). A model for the injection boundary conditions in the context of 3D Simulation of Diesel Spray : Methodology and Validation. *Fuel*, 89(1) :219–228. 51, 84, 85, 96, 97, 117, 131, 136, 159
- Martinez, L., Vié, A., Jay, S., Benkenida, A., and Cuenot, B. (2009). Large Eddy Simulation of Fuel sprays using the Eulerian Mesoscopic Approach. Validations in realistic engine conditions. In *11th ICLASS International Conference on Liquid Atomization and Spray Systems*, Vail, Colorado, USA. 57
- Mastorakos, E., Baritaud, T., and Poinso, T. (1997). Numerical Simulations of Autoignition in Turbulent Mixing Flows. *Combustion and Flame*, 109 :198–223. 69, 103
- Mauss, F. (1998). *Entwicklung eines kinetischen Modells der Russbildung mit schneller Polymerisation*. PhD thesis, RWTH Aachen. 161
- Michel, J.-B. (2008). *Modélisation de la combustion turbulente d'un mélange hétérogène en auto-inflammation en vue de l'application à la simulation des moteurs Diesel*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 27, 150, 160
- Michel, J.-B., Colin, O., and Angelberger, C. (2010). On the formulation of species reaction rates in the context of multi-species CFD codes using complex chemistry tabulation techniques. *Combustion and Flame*, 157 :701–714. 88
- Michel, J.-B., Colin, O., Angelberger, C., and Veynante, D. (2009a). Using the tabulated diffusion flamelet model ADF-PCM for simulating a lifted methane-air jet flame. *Combustion and Flame*, 156 :1318–1331. 37, 81, 123, 177
- Michel, J.-B., Colin, O., and Veynante, D. (2008). Modeling ignition and chemical structure of partially premixed turbulent flames using tabulated chemistry. *Combustion and Flame*, 152 :80–99. 36, 61, 65, 68, 78, 92, 94, 123, 178
- Michel, J.-B., Colin, O., and Veynante, D. (2009b). Comparison of differing formulations of the PCM model by their application to the simulation of an auto-igniting H₂/air jets. *Flow, Turbulence and Combustion*, 83 :33–60. 34, 37, 61, 81, 123
- Mittal, V., Cook, D., and Pitsch, H. (2012). An extended multi-regime flamelet model for IC engines. *Combustion and Flame*, 159 :2767 – 2776. 33
- Moin, P., Squires, K., Cabot, W., and Lee, S. (1991). A dynamic subgrid-scale model for compressible turbulence and scalar transport. *Physics of Fluids*, A 3(11) :2746–2757. 48
- Moreau, J.-B. (2005). *Modélisation de l'écoulement polyphasique à l'intérieur et en sortie des injecteurs Diesel*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse. 52, 54
- Moureau, V., Lartigue, G., Sommerer, Y., Angelberger, C., Colin, O., and Poinso, T. (2005). High-order methods for DNS and LES of compressible multi-component reacting flows on fixed

- and moving grids. *Journal of Computational Physics*, 202(2) :710–736. 27, 83, 96, 101, 123, 126, 130
- Musculus, M. P. B. and Pickett, L. M. (2009). Entrainment Waves in Diesel Jets. *SAE Paper 2009-01-1335*. 102, 116
- Nafe, J. and Maas, U. (2003). Hierarchical generation of ILDMs of higher hydrocarbons. *Combustion and Flame*, 135 :17 – 26. 33
- Netzell, K. (2006). *Development and application of detailed kinetic models for soot particle size distribution function*. PhD thesis, Lund Universit. 161
- Novella, R., Garcia, A., Pastor, J. M., and Domenech, V. (2010). The role of detailed chemical kinetics on CFD Diesel spray ignition and combustion modelling. *Mathematical and Computer Modelling*, 54 :1706 – 1719. 122, 123, 145
- Oijen, J., Lammers, F., and deGoey, L. (2001). Modeling of complex premixed burner systems by using Flamelet Generated Manifolds. *Combustion and Flame*, 127 :2124–2134. 35
- Peirano, E. and Leckner, B. (1998). Fundamentals of turbulent gas-solid flows applied to circulating fluidized bed combustion. *Progress in Energy and Combustion Science*, 24 :259–296. 55
- Pera, C., Réveillon, J., Vervisch, L., and Domingo, P. (2006). Modeling subgrid scale mixture fraction variance in LES of evaporating spray. *Combustion and Flame*, 146 :635 – 648. 21, 89, 127
- Peters, N. (1984). Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10 :319–339. 27, 30, 33, 36, 62, 81, 92
- Peters, N. (1985). Numerical and asymptotic analysis of systematically reduced reaction schemes for hydrocarbon flames. In R. Glowinsky, B. L. and Temam, R., editors, *Numerical simulation of combustion phenomena*, volume 241, pages 90 – 109. Springer-Verlag, Berlin. 123, 124
- Peters, N. (1986). Laminar flamelet concepts in turbulent combustions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 21 :1231 – 1250. 65, 81
- Peters, N. (1988). Turbulent modeling, scales and flame structure of premixed turbulent flames. 63
- Peters, N. (2000). *Turbulent combustion*. Cambridge University Press. 63, 81, 93, 124
- Peters, N., Paczko, G., Seiser, R., and Seshadri, K. (2002). Temperature cross-over and non-thermal runaway at two-stage ignition of N-heptane. *Combustion and Flame*, 128 :38 – 59. 67



- Pickett, L., Siebers, D., and Idicheria, C. (2005). Relationship Between Ignition Processes and the Lift-Off Length of Diesel Fuel Jets. *SAE paper 2005-01-3843*. 42, 123, 133
- Pierce, C. and Moin, P. (1998). A dynamic model for subgrid scale variance and dissipation rate of a conserved scalar. *Physics of Fluids*, 10(12) :3041–3044. 94, 127
- Pierce, C. and Moin, P. (2004). Progress-variable approach for Large-Eddy Simulation of non-premixed turbulent combustion. *Journal of Fluid Mechanics*, 504 :73–97. 36, 61, 81
- Pischinger, S., Reuter, U., and Scheid, E. (1988). Self-Ignition of Diesel Spray and its Dependence on Fuel Properties and Injection Parameters. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 110 :399 – 404. 24
- Pitsch, H., Barths, H., and Peters, N. (1996). Three-dimensional modeling of NOx and soot formation in DI-Diesel engines using detailed chemistry based on the interactive flamelet approach. *SAE paper*, 962057. 33, 122
- Pitsch, H. and Peters, N. (1998). A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combustion and Flame*, 114 :26–40. 63
- Pitsch, H., Wan, Y., and Peters, N. (1995). Numerical investigation of soot formation and oxidation under Diesel engine conditions. *SAE paper*, 952357. 33, 61, 81
- Poinsot, T. and Veynante, D. (2011). *Theoretical and Numerical Combustion, Third Edition*. 31, 46, 48, 83, 157
- Pope, S. (1985). PDF methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11(11) :119–192. 32
- Pope, S. B. (1997). Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation. *Combustion Theory and Modelling*, 1 :41 – 63. 35
- Pope, S. B. (2004). Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics*, 6 :35. 100, 101
- Rao, S. and Rutland, C. (2003). A flamelet time scale model for non-premixed combustion including chemical kinetic effects. *Combustion and Flame*, 133 :189 – 191. 39, 82
- Reitz, R. D. and Rutland, C. J. (1995). Development and Testing of Diesel Engine CFD Models. *Progress in Energy and Combustion Science*, 21 :173 – 196. 21
- Riber, E., Garcia., M., Moureau, V., Pitsch, H., Simonin, O., and Poinsot, T. (2006). Evaluation of numerical strategies for LES of two-phase reacting flows. In *Proc of the Summer Program*, pages 197–213. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ. 54

- Riber, E., Moreau, M., Simonin, O., and Cuenot, B. (2005). Towards Large Eddy Simulation of Non-Homogeneous Particle Laden Turbulent Gas Flows Using Euler-Euler Approach. In *11th Workshop on Two-Phase Flow Predictions*, Merseburg, Germany. 54
- Ribert, G., Gicquel, O., Darabiha, N., and Veynante, D. (2006). Tabulation of complex chemistry based on self-similar behavior of laminar premixed flames. *Combustion and Flame*, 146 :649–664. 35, 159
- Ribert, G., Wang, K., and Vervisch, L. (2012). A multi-zone self-similar chemistry tabulation with application to auto-ignition including cool-flames effects. *Fuel*, 91 :87 – 92. 35, 159
- Richard, S. (2005). *Simulation aux grandes échelles de la combustion dans les moteurs à allumage commandé*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 21
- Richard, S., Colin, O., Vermorel, O., Benkenida, A., Angelberger, C., and Veynante, D. (2007). Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(3059-3066). 22
- Roache, P. (1998). *Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. hermosa publishers. 178
- Robert, A., Martinez, L., Tillou, J., and Richard, S. (2012). Eulerian - Eulerian Large Eddy Simulations applied to transient Diesel sprays. *Accepted to Oil & Gas Science and Technology*. 115, 116, 117
- Sagaut, P. (2005). *Large-Eddy Simulation for incompressible flows - An introduction, third edition*. Scientific computation series. Springer-Verlag. 48
- Seiser, R., Pitsch, H., Seshadri, K., Pitz, W. J., and Curran, H. J. (2000). Extinction and auto-ignition of n-heptane in counterflow configuration. *Symposium (International) on Combustion*, 28 :2029 – 2037. 67, 68, 125, 136, 145
- Seo, J., Lee, D., Huh, K. Y., and Chung, J. (2010). Combustion Simulation of a Diesel Engine in the pHCCI Mode with Split Injections by the Spatially Integrated CMC Model. *Combustion Science and Technology*, 182 :9 :1241 – 1260. 33, 40, 80, 81, 82, 123
- Siebers, D. and Higgins, B. (2001). Flame lift-off on direct-injection diesel sprays under quiescent conditions. *SAE Paper 2001-01-0530*. 121, 122, 129
- Siebers, D., Higgins, B., and Pickett, L. (2002). Flame Lift-Off on Direct-Injection Diesel Fuel Jets : Oxygen Concentration Effects. *SAE paper 2002-01-0890*. 123, 129, 130, 134
- Simonin, O. (2002). Gas Particules. Cours d’options, Ecole Nationale Supérieure d’Electrotechnique, d’Electronique, d’Informatique, d’Hydraulique et des Télécommunications. 53
- Smagorinsky, J. (1963). General circulation experiments with the primitive equations. I : The basic experiment. *Monthly Weather Review*, 91(3) :99–164. 48, 86, 96, 127, 130



- Smirnov, A., Shi, S., and Celik, I. (2001). Random flow generation technique for Large-Eddy Simulations and particle-dynamics modeling. *Trans. ASME. Journal of Fluids Engineering*, 123 :359–371. 96
- Spalding, D. (1976). Development of the Eddy Break Up of turbulent combustion. In *16th Symposium (Int.) on Combustion*, pages 1657–1663, The Combustion Institute, Pittsburgh. 37
- Spalding, D. B. (1953). The combustion of liquid fuels. *Proceedings of the Combustion Institute*, pages 847 – 863. 52, 85, 127, 129
- Staffelbach, G., Gicquel, L., Boudier, G., and Poinso, T. (2009). Large Eddy Simulation of self excited azimuthal modes in annular combustors. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32. 22
- Staffelbach, G., Gicquel, L., and Poinso, T. (2005). Highly parallel large eddy simulation of multiburner configurations in industrial gas turbines. *The Cyprus International Symposium on Complex Effects in Large Eddy Simulation*. 27
- Staffelbach, G. and Poinso, T. (2006). High Performance Computing for Combustion Applications. In *Super Computing 2006*, Tampa, Florida, USA. 27
- Sutherland, W. (1893). The Viscosity of Gases and Molecular Force. *Philosophical Magazine*, 36 :507 – 531. 49, 85, 127
- Syrota, J. (2008). Le véhicule "grand public" d'ici 2030. Technical report, Centre d'analyse stratégique. 19
- Tap, F. and Veynante, D. (2004). Simulation of flame lift-off on a Diesel jet using a generalized flame surface density modelling approach. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :919 – 926. 42, 122, 138
- Van Oijen, J. A. and De Goey, L. (2002). Modelling of premixed counterflow flames using the flamelet-generated manifold method. *Combustion Theory and Modelling*, 6 :463 – 478. 35
- Van Oijen, J. A. De Goey, L. (2004). A numerical study of confined triple flames using a flamelet-generated manifold. *Combustion Theory and Modelling*, 8 :141 – 163. 35
- Venugopal, R. and Abraham, J. (2007). A numerical investigation of flame lift-off in Diesel jets. *Combustion Science and Technology*, 179 :12 :2599 – 2618. 122, 125
- Vermorel, O., Richard, S., Colin, O., Angelberger, C., and Benkenida, A. (2009). Toward the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES. *Combustion and Flame*, 156 :1525 – 1541. 22

- Vervisch, L., Bidaux, E., Bray, K. N. C., and Kollmann, W. (1995). Surface density function in premixed turbulent combustion modeling, similarities between probability density function and flame surface approaches. *Physics of Fluids A*, (7) :2496. 32
- Vervisch, L., Hauguel, R., Domingo, P., and Rullaud, M. (2004). Three facets of turbulent combustion modelling : DNS of premixed V-flame, LES of lifted nonpremixed flame and RANS of jet-flame. *Journal of Turbulence*, 5(4) :1–36. 34
- Vervisch, P. E. (2012). *Modélisation des oxydes d'azote et des suies dans les moteurs Diesel*. PhD thesis, Ecole Centrale Paris. 161
- Vervisch, P. E., Colin, O., Michel, J.-B., and Darabiha, N. (2011). No relaxation approach (NORA) to predict thermal no in combustion chambers. *Combustion and Flame*, 158(8) :1480 – 1490. 161
- Vié, A. (2009). Prise en compte des mécanismes d'atomisation secondaire pour la simulation aux grandes échelles des jets de carburants liquides dans les moteurs à combustion interne. Technical report. 57
- Vreman, A., Albrecht, B., Van Oijen, J., de Goey, L., and Bastiaans, R. (2008). Premixed and nonpremixed generated manifolds in large-eddy simulation of Sandia flame D and F. *Combustion and Flame*, 153 :394 – 416. 35
- Wang, H., Warner, J., Oehlschlaeger, A., Bounaceur, R., Biet, J., Glaude, P.-A., and Battin-Leclerc, F. (2010). An experimental and kinetic modeling study of the autoignition of a-methylnaphthalene/air and a-methylnaphthalene/n-decane/air mixtures at elevated pressures. *Combustion and Flame*, 157 :1976 – 1988. 35, 98, 112
- Williams, F. (1985). *Combustion theory (2nd ed.)*. Addison-Wesley. 50, 85
- Wright, Y., Margari, O. N., Boulouchos, K., De Paola, G., and Mastorakos, E. (2009). Experiments and Simulations of N-Heptane Spray Auto-Ignition in a Closed Combustion Chamber at Diesel Engine Conditions. *Flow, Turbulence and Combustion*, 84 :49 – 78. 37, 81
- Yang, B. and Pope, S. B. (1998). Treating chemistry in combustion with detailed mechanisms - In situ adaptive tabulation in principal directions - Premixed combustion. *Combustion and Flame*, 112 :85 – 112. 36
- Yang, G. and Peng, D. P. (2000). Weighted ENO schemes for Hamilton-Jacobi equations. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 21 :2126 – 2143. 41
- Yang, Y., Boehman, A. L., and Simmie, J. M. (2010). Effects of molecular structure on oxidation reactivity of cyclic hydrocarbons : Experimental observations and conformational analysis. *Combustion and Flame*, 157 :2369–2379. 80



- Yu, R., Bai, X. S., Lehtiniemi, H., Ahmed, S. S., Mauss, F., Richter, M., Aldén, M., Hildingsson, L., Johansson, B., and Hultqvist, A. (2006). Effect of Turbulence and Initial Temperature Inhomogeneity on Homogeneous Charge Compression Ignition Combustion. *SAE paper 2006-01-3318*. 41
- Zhang, Y., Kung, E., and Haworth, D. (2005). A PDF method for multidimensional modeling of HCCI engine combustion : effects of turbulence/chemistry interactions on ignition timing and emissions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30 :2763 – 2771. 32, 37

Annexe A

Génération de la table ADF-PCM

Nous proposons dans cette annexe de décrire plus en détail le processus de génération d'une table ADF-PCM. La méthodologie présentée ici permet de créer des tables utilisables dans des conditions moteurs puisqu'elle prend en compte le taux d'EGR et la pression. Une méthodologie a aussi été développée pour la prise en compte de la distribution en sous-maille de l'étirement suivant une loi log-normale, comme proposé par [Michel et al. \(2009a\)](#) dans le modèle ADF-PCM $_{\chi}$. Celle-ci n'ayant pas été utilisée dans les travaux présentés, elle n'est pas décrite dans les explications qui suivent.

A.1 Création des tables de réacteurs homogènes

La première étape de la génération d'une table ADF-PCM a pour but de tabuler les fractions massiques des espèces ainsi que le taux de réaction de Y_c . Pour cela, des réacteurs homogènes à pression constante sont résolus pour différentes conditions initiales par le solveur chimique SENKIN. L'évolution de la combustion est décrite par la variable de progrès c (Eq. 4.9). La table A.1 présente la discrétisation utilisée pour les réacteurs homogènes dans le cas du Spray H.

	Plage	Nombre de points	Distance entre 2 points
Fraction de mélange Z	0 - 0.5	125	0.04
Température initiale T_u	300 - 1000 K	21	35 K
Variable de progrès c	0 - 1	1000	Non-linéaire

TABLE A.1 – Discrétisation des calculs de réacteurs homogènes pour la réalisation de la table utilisée pour la simulation du spray H.

Pour la discrétisation en avancement, les deux premiers points sont fixés à 0 et 1.10^{-6} de façon à reproduire avec précision le délai d'auto-inflammation. Le reste des points est ensuite distribué



de façon quadratique entre 1.10^{-6} et 1.

Ces réacteurs homogènes sont ensuite utilisés de façon à générer des tables de réacteurs homogènes dédiées à chacune des flammelettes qui seront calculées dans les étapes suivantes. Les flammelettes étant calculées aux mêmes valeurs de pression et de taux d'EGR que les réacteurs homogènes, seule une interpolation pour reconstruire la stratification en température est nécessaire. Cette étape est illustrée par la figure A.1.

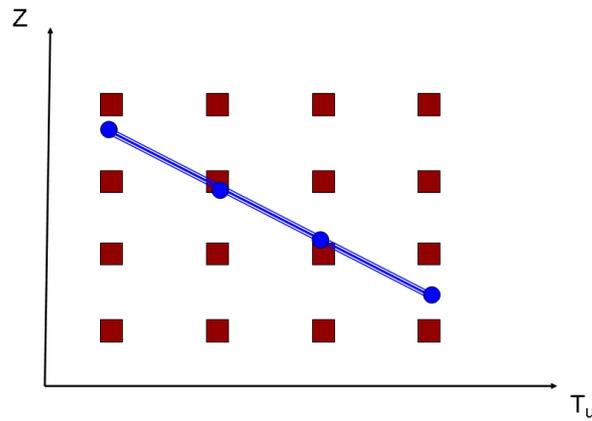


FIGURE A.1 – Représentation dans l'espace (Z, T_u) de la répartition des calculs de réacteurs homogènes (en rouge) et de la fonction $T_u(Z)$ (en bleu). Les points reconstruits par interpolation sont représentés par des ronds bleus.

A.2 Résolution des flammelettes

L'étape suivante consiste à résoudre les flammelettes dans différentes conditions pour une gamme d'étirements définie. Pour cela, un code permettant l'intégration numérique de l'équation des flammelettes est utilisé. Celui-ci a été initialement développé pour résoudre l'équation des flammelettes via un schéma numérique centré du second ordre (Michel et al., 2008). La stabilité de ce schéma n'est assurée que si une condition de type Fourier (Roache, 1998) est vérifiée :

$$\chi \frac{\Delta t}{\Delta Z^2} \leq 0.5 \quad (\text{A.1})$$

Nous voyons ici la très forte dépendance du pas de temps à la discrétisation en Z de la flammelette et à l'étirement. De façon à ne pas trop réduire le pas de temps tout en gardant une bonne discrétisation de la flammelette dans l'espace de la fraction de mélange, cette dernière est résolue sur 150 points entre 0 et 0,5. Pour réduire les temps de calcul de génération de la table, une approche de type Crank-Nicholson (Michel et al., 2008) est utilisée lorsque l'étirement dépasse la valeur de 500 s^{-1} . Cette méthode mixte implicite-explicite possède l'avantage d'être inconditionnellement stable et ne limite donc pas le pas de temps. Néanmoins, lorsque le pas de

temps diffusif n'est plus limitant sur le pas de temps du calcul, c'est le pas de temps chimique qui le devient. Celui-ci varie à chaque itération en fonction du taux de réaction maximal de la flammelette. Ces variations du pas de temps sont extrêmement coûteuses en temps de calcul pour les schémas implicites ou mixtes car ceux-ci doivent opérer des inversions matricielles. Ainsi, il est nécessaire que le pas de temps diffusif soit limitant pour que le pas de temps du calcul reste fixe. La figure A.2 nous présente l'évolution du délai nécessaire à l'obtention d'un avancement de 0.5 pour un schéma numérique explicite et un schéma numérique de type Crank-Nicholson pour deux pas de temps différents. Ces résultats ont été obtenus pour une flammelette soumise à un étirement de 2000 s^{-1} dans les conditions suivantes : $T_a = 900\text{K}$, $T_f = 600\text{K}$, $p = 42,25 \text{ bars}$.

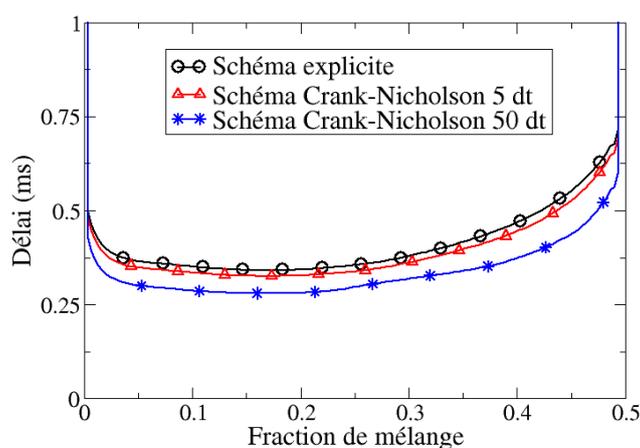


FIGURE A.2 – Délai nécessaire à l'obtention d'un avancement $c = 0.5$ pour une flammelette soumise à un étirement de 2000 s^{-1} pour différents schémas numériques. Les conditions du calcul sont les suivantes : $T_a = 900\text{K}$, $T_f = 600\text{K}$, $p = 42,25 \text{ bars}$.

Nous observons une sous-estimation du délai pour la simulation utilisant un schéma de type Crank-Nicholson avec un pas de temps 50 fois plus grand que celui du schéma explicite. Néanmoins, si ce pas de temps n'est que de 5 fois le pas de temps du schéma explicite, les différences entre les deux schémas sont beaucoup plus faibles. Pour ces raisons, nous avons fixé le pas de temps diffusif à 5 fois le pas de temps du schéma explicite de façon à s'assurer que le schéma de Crank-Nicholson n'introduise pas d'erreurs significatives sur les résultats.

A.3 Génération de la table finale

Pour le cas d'un mélange sans EGR, la discrétisation des fractions de mélange filtrées utilisées comme entrées de table doit être définie de façon à représenter une large gamme de richesses (typiquement de 0 à 10) et doit être raffinée à la stœchiométrie. En présence d'EGR, la richesse



ϕ s'écrit (Jay et al., 2007b) :

$$\Phi = \frac{\alpha_s (1 + \beta_0)}{\frac{1 - Y_{EGR}}{Z} - 1 + Y_{EGR}} \quad (\text{A.2})$$

avec α_s le rapport massique entre le carburant et l'oxygène à la stœchiométrie et β_0 le rapport massique entre N_2 et O_2 de l'air ambiant. Ainsi, la richesse n'est plus définie uniquement par la fraction de mélange mais aussi par le taux d'EGR.

Dans le cas d'une table faiblement discrétisée en taux d'EGR, une discrétisation fixe en \tilde{Z} quel que soit le taux d'EGR ne permet pas de s'assurer de la bonne représentation de toute la gamme de richesses et encore moins de la stœchiométrie. Dans ces conditions, l'utilisation de la richesse comme paramètre de tabulation est plus pertinent, surtout du point de vue des émissions polluantes fortement dépendantes de ce paramètre. Ainsi, la table ADF-PCM est construite à partir d'une discrétisation fixée en terme de richesse. Une discrétisation en fraction de mélange, spécifique à chaque EGR, est ensuite reconstruite dans le code. Ce formalisme abouti à une table non carrée en \tilde{Z} qui doit être traitée de façon spécifique lors de l'interpolation du couple (\tilde{Z}, Y_{EGR}) comme indiqué par les travaux de Jay et al. (2007b).

La dernière étape de la génération de la table consiste à appliquer la β -PDF sur la fraction de mélange pour chaque flammelette afin d'obtenir les fractions massiques filtrées des espèces (Eq. 6.9) et le taux de réaction filtré (Eq. 6.10) de Y_c . De façon à permettre une description fine de la β -PDF, celle-ci est calculée sur 300 points. Une part importante du temps de génération de la table est dédiée au calcul de la fonction β . De façon à réduire ce temps de calcul, la fonction β est calculée une fois pour chaque valeur de \tilde{Z} et S_z utilisée dans la table et stockée en mémoire, ce qui réduit de façon importante la part de cette opération dans le temps de calcul total de la table.