



THESE

En vue de l'obtention du

DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ DE TOULOUSE

Délivré par Institut National Polytechnique de Toulouse

Discipline ou spécialité : Dynamique des fluides

Présentée et soutenue par Benoît ENAUX

Le 16 juin 2010

Simulation aux Grandes Échelles d'un moteur à allumage commandé - Évaluations des variabilités cycliques

JURY

J. BORÉE	Professeur au LEA/ENSMA	Rapporteur
O. COLIN	HDR / Ingénieur à l'IFP	Rapporteur
P. GUIBERT	Professeur à l'Université Pierre et Marie Curie	Examineur
R. BAZILE	Maître de Conférence à l'IMFT	Examineur
L. THOBOIS	Docteur / Ingénieur à PSA Peugeot Citroën	Co-Directeur de thèse
T. POINSOT	Directeur de recherche à l'IMFT	Directeur de thèse

École doctorale : Mécanique, Energétique, Génie civil, Procédés

Unité de recherche : CERFACS

Directeur de Thèse : Thierry POINSOT

Co-Directeur de Thèse : Ludovic THOBOIS

Table des matières

Table des matières	2
Remerciements	7
Nomenclature	9
1 Introduction	13
1.1 Les variations cycle à cycle	15
1.2 Etat de l'art en SGE de moteurs automobiles	20
1.3 Objectifs de l'étude et choix méthodologiques	26
1.4 Organisation du manuscrit	28
I Equations et modèles pour les écoulements gazeux réactifs	29
2 Equations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs	35
2.1 Équations et variables conservatives	35
2.2 Variables thermodynamiques	37
2.3 Équation d'état des gaz parfaits	37
2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces	38
2.5 Diffusion de la chaleur	39

2.6	Coefficients de transport diffusif	39
2.7	Cinétique chimique	40
3	Equations pour la SGE réactive	43
3.1	Équations SGE	44
3.2	Modèles de sous-maille	47
3.3	Modèle de combustion turbulente	49
3.4	Modélisation des frontières du domaine de calcul	55
4	Approche numérique	61
4.1	Discrétisation du domaine : <i>une approche Cell-Vertex</i>	61
4.2	Schémas numériques	63
4.3	Avancement en temps	64
4.4	Viscosité artificielle	65
4.5	Maillage mobile : une méthode ALE	66
4.6	Traitement des chocs	69
5	Cinétique chimique à 2 étapes propane-air	79
5.1	Données disponibles	80
5.2	Le mécanisme réduit	83
5.3	Utilisation du mécanisme à 2 étapes dans AVBP	90
5.4	Conclusion	95
6	Modélisation de l'allumage : le modèle ED (<i>Energy Deposition</i>)	97
6.1	Physique d'un allumage par bougie	98
6.2	Description du modèle de dépôt d'énergie	99
6.3	Tests de validation en DNS	100
6.4	Le modèle d'allumage ED en SGE	108
6.5	Conclusion sur le modèle d'allumage par dépôt d'énergie	112

II	Développement d'une méthodologie SGE en moteur entraîné	113
7	Evaluation des éléments tétraédriques en maillage mobile	117
7.1	Configuration expérimentale	118
7.2	Configuration numérique	119
7.3	Premier calcul SGE	122
7.4	Influence du raffinement de maillage	123
7.5	Influence du type d'élément	128
7.6	Conclusion	131
8	Simulation SGE du banc F7P en moteur entraîné	133
	LES of a motored single-cylinder piston engine	134
	Compléments au chapitre 8	163
III	Application de la méthodologie SGE en moteur avec combustion	171
9	Simulation d'un point stable du banc moteur F7P	175
9.1	Description du point de fonctionnement : le point <i>stab_ref</i>	175
9.2	Stratégie numérique	178
9.3	Résultats et discussion	180
9.4	Conclusion	202
10	Simulation d'un point instable du banc F7P	205
10.1	Description du point <i>instab_dil</i>	205
10.2	Modélisation par SGE	206
10.3	Résultats	210
10.4	Conclusion	222
	Conclusion générale	227

Bibliographie	229
Annexes	241
A La décomposition en modes propres : POD	241
B Article soumis au Symposium de Combustion	243
Résumé	258

Remerciements

Je tiens à exprimer ma gratitude à toutes les personnes qui ont contribué à faire des ces 3 années (... et un bonus de 9 mois) une expérience très enrichissante.

Je remercie Thierry Poinot d'avoir accepté de diriger cette thèse et de m'avoir donné le cadre nécessaire pour produire une recherche de haut niveau. Je retiens tout particulièrement la pertinence de ses conseils. Je remercie également Ludovic Thobois pour l'encadrement de cette thèse et pour le regard éclairé de motorise qu'il a porté sur mes résultats.

Mes remerciements vont naturellement à Jacques Borée et Olivier Colin qui ont accepté d'être rapporteurs de ma thèse, ainsi qu'à Philippe Guibert et Rudy Bazile pour avoir examiné ma soutenance.

Je me tourne maintenant vers les membres de l'équipe CFD du CERFACS qui m'ont accompagné pendant cette thèse. Nombreuses sont les personnes que je souhaite remercier, je ne ferai pas de liste exhaustive mais que toutes les personnes sachent que les années passées ici ont été un véritable plaisir grâce à elles.

Dans un premier temps, je tiens à remercier vivement Olivier Vermorel dit "Papy Soupape" qui a grandement contribué à la réalisation de cette thèse. Sa disponibilité, son soutien sans faille ainsi que les nombreux conseils qu'il m'a prodigués m'ont indéniablement permis de mener à bien ces travaux. Merci également à Victor Granet ou "Baby Soupape", complice de simulation de moteur à piston, qui a été d'une aide précieuse dans la dernière année de thèse.

Je salue ensuite tous mes collègues avec qui j'ai partagé ou je partage encore le bureau et qui m'ont formé à la CFD au cours de cette thèse. Merci à Matthieu Boileau (M. PIXAR qui manie comme personne les outils de visualisation), Guilhem Lacaze (qui a un peps d'enfer), Kerstin Wiczorek (qui a une sacrée recette de vin chaud), et Yoann Cheny (enfin ... Igor Cheval) qui m'a rejoint sur la fin.

Merci également aux plus "anciens" : Eleonore Riber, Simon Mendez, Florent Duchaine, Matthieu Leyko, Olivier Cabrit, Jean-Matthieu Senoner, sans oublier Anthony Roux que j'ai tané pour comprendre la POD (Chuck N. n'aurait pas été de meilleur conseil).

Une autre pensée va pour tous les amis : Olivia, Nico, Sophie, Tom qui m'ont permis de m'aérer l'esprit par les soirées et les vacances passées ensemble.

Enfin mes derniers mots vont tout naturellement à mes parents qui m'ont permis d'évoluer dans un cadre propice à mon épanouissement, ainsi qu'évidemment à Cécile qui a une part non négligeable dans la réalisation de cette thèse. Elle m'a accompagné et supporté sans jamais faillir durant ces années. Je ne peux conclure ces remerciements sans avoir une pensée pour mes grands parents, c'est à vous que je dédie cette thèse.

Nomenclature

Lettres romaines

$^{\circ}V$	degré vilebrequin	A	la jacobienne
A	coefficient de réflexion	\mathcal{L}	ondes
D	matrice des résidus	\mathcal{M}_{kj}	réactif ou produit k de la réaction j
F	tenseur des flux	Q_j	taux d'avancement
f	1 ^{ère} composante du tenseur des flux	\mathcal{R}	constante universelle des gaz parfaits
g	2 ^{ème} composante du tenseur des flux	\mathcal{R}_i	résidu du noeud i
h	3 ^{ème} composante du tenseur des flux	A	constante pré-exponentielle
I	matrice indicatrice	A_L	surface de la flamme laminaire
J_k	flux diffusif de l'espèce k	A_T	surface de la flamme turbulente
q	flux de chaleur	c	vitesse du son
r_e	résidu associé à la cellule Ω_e	C_p	capacité calorifique à pression constante
S	tenseur des déformations	C_S	constante du modèle de Smagorinsky
s_c	vecteur du terme source chimique	C_v	capacité calorifique à volume constant
T	taux de tumble	D_S	diamètre de la tête de soupape
u	vecteur vitesse	D_{ij}	coefficient de diffusion binaire
V^c	vitesse de diffusion corrective	D_k	diffusivité moléculaire dans le mélange
V^k	vitesse de diffusion de l'espèce k	D_{th}	diffusivité thermique
w	vecteur des variables conservatives	E	fonction d'efficacité
\dot{X}	vitesse de grille	E	énergie totale (non chimique) (section 2.1)
\dot{Q}	terme source du modèle d'allumage ED par dépôt d'énergie	E_i	énergie interne
		E_a	énergie d'activation
		e_s	énergie sensible
		F	facteur d'épaississement
		h	enthalpie du mélange
		I_0	facteur d'étirement
		K	étirement de la flamme
		K_p	coefficient de relaxation de la condition NSCBC
		K_{eq}	constante d'équilibre
		K_f	constante de la réaction directe

K_r	constante de la réaction inverse	Δ_s	diamètre du noyau de dépôt d'énergie (modèle ED)
L_S	levée de la soupape	Δ_t	durée du dépôt d'énergie (modèle ED)
l_t	échelle intégrale	$\delta_{i,j}$	symbole de Kronecker
P	pression	δ_L	épaisseur de la flamme
R	rayon de la flamme	$\dot{\omega}_{kj}$	taux de réaction de l'espèce k dans la réaction j
r	constante du gaz	$\dot{\omega}_k$	taux de réaction de l'espèce k
S	capteur du modèle d'épaississement dynamique (section 3.3)	$\dot{\omega}_T$	taux de dégagement de chaleur
s	entropie sensible (section 2.2)	η	échelle de Kolmogorov
S_c	vitesse de consommation	γ	exposant polytropique
S_d	vitesse de déplacement	κ	viscosité de volume
S_L	vitesse de flamme	λ	conductivité thermique
S_T	vitesse de flamme turbulente	μ	viscosité dynamique
T	température	ν	viscosité cinématique
t	temps	ν''_{kj}	coefficient stœchiométrique des produits
U_P	vitesse du piston	ν'_{kj}	coefficient stœchiométrique des réactifs
V_e	volume de la cellule primaire	ν_{kj}	coefficient stœchiométrique global
V_i	volume de la cellule duale	Ω	domaine de calcul (chapitre 4)
W	masse molaire	Ω	fonction de présence du modèle DTF
X	fraction molaire	Ω_{RPM}	Régime moteur
Y	fraction massique	Ω_e	cellule primaire
z	fraction de mélange	Φ	Richesse
Lettres grecques		ρ	masse volumique
α	constante de la fonction d'efficacité	Σ	densité de surface de flamme
β	constante de la fonction d'efficacité (section 3.3.2)	σ	écart type
β	exposant de la température dans la loi d'Arrhenius	τ_η	temps de retournement associée à l'échelle de Kolmogorov η
Δt	pas de temps	τ_c	temps chimique
Δx	taille caractéristique du maillage	τ_t	temps de retournement associée à l'échelle intégrale l_t
Δ_e	taille du filtre utilisé dans le modèle TFLES		

Θ	variable d'avancement
ε_i	énergie totale déposée par le modèle d'allumage ED
ζ	capteur pour la viscosité artificielle
ω	vecteur de vortacité
σ	tenseur des contraintes
τ	tenseur des contraintes visqueuses

Nombres sans dimension

Da	nombre de Damköhler
Ka	nombre de Karlovitz
Pr	nombre de Prandtl
Re	nombre de Reynolds
Sc	nombre de Schmidt

Opérateurs

$\langle \cdot \rangle_n$	moyenne de phase sur n cycles moteur
$\{ , \}$	produit scalaire
$\mathcal{F}(\cdot)$	transformée de Fourier
\bar{f}	filtrage temporel au sens de Reynolds
\tilde{f}	filtrage spatial au sens de Favre

Indices

0	état de référence
1	1ère composante
2	2ème composante
3	3ème composante
F	relatif au carburant
f	quantité conditionnée par la flamme
k	relatif à l'espèce k
O	relatif à l'oxydant
t	contribution turbulente

Exposants

'	relatif à la fluctuation
---	--------------------------

0	état de référence
moy	moyenne sur le domaine de calcul
GB	relatif aux gaz brûlés
GF	relatif aux gaz frais
I	partie non diffusive
m	valeur molaire
t	contribution turbulente
V	partie diffusive

Abréviations

COV_{PMI}	Covariance de la pression moyenne indiquée
CA_{Pmax}	Degré vilebrequin d'occurrence de la pression cylindre maximum
CA_X	Degré vilebrequin où X% de la masse enfermée a brûlé
CAD	<i>Crank Angle Degrees</i>
$AKTIM$	<i>Arc and Kernel Tracking Ignition Model</i>
ALE	<i>Arbitrary Lagrangian Eulerian</i>
AVA	<i>AVance à l'Allumage</i>
CCV	<i>Cycle-to-Cycle Variations</i>
CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
CFM	<i>Coherent Flame Model</i>
CL	<i>Conditions aux Limites</i>
CPU	<i>Central Processing Unit</i>
DES	<i>Detached Eddy Simulation</i>
DNS	<i>Direct Numerical Simulation</i>
DTF	<i>Dynamically Thickened Flame</i>
ED	<i>Energy Deposition</i>
EGR	<i>Exhaust Gas Recirculation</i>
EVC	<i>Exhaust Valve Closure</i>
EVO	<i>Exhaust Valve Opening</i>

FA	Fermeture Admission	RMS	<i>Root Mean Square</i>
FE	Fermeture Échappement	SGE	Simulation aux Grandes Échelles
FMB	Fraction de Masse Brûlée	SGEmac	Simulation aux Grande Échelles pour la prédiction des variations cycliques dans les moteurs à allumage commandé
GBR	Gaz Brûlés Recirculés	SGS	<i>Sub-Grid Scale</i>
IB	<i>Immersed Boundaries</i>	SST	<i>Shear Stress Transport</i>
IDE	Injection Directe Essence	TDC	<i>Top Dead Center</i>
IFP	Institut Français du Pétrole	TF	<i>Thickened Flame</i>
IGR	<i>Internal Gas Recirculation</i>	TFLES	<i>TF model for LES</i>
IIE	Injection Indirecte Essence	VCC	Variations Cycle à Cycle
IMEP	<i>Indicated Mean Effective Pressure</i>		
IMFT	Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse		
IVC	<i>Intake Valve Closure</i>		
IVO	<i>Intake Valve Opening</i>		
LDA	<i>Laser Doppler Anemometry</i>		
LES	<i>Large Eddy Simulation</i>		
LESSCO2	LES techniques to Simulate and Control by design Cyclic variability in Otto cycle engines		
LIF	<i>Laser-Induced Fluorescence</i>		
MPI	<i>Message Passing Interface</i>		
NSCBC	<i>Navier-Stokes Characteristic Boundary Condition</i>		
OA	Ouverture Admission		
OE	Ouverture Échappement		
PIV	<i>Particle Image Velocimetry</i>		
PMB	Point Mort Bas		
PMH	Point Mort Haut		
PMI	Pression Moyenne Indiquée		
POD	<i>Proper Orthogonal Decomposition</i>		
RANS	<i>Reynolds Averaged Navier-Stokes</i>		

Introduction

Aujourd'hui, selon le 2006 *BP Statistical Review of World Energy* près de la moitié des réserves de pétrole ont été épuisées. Un problème énergétique se pose donc pour les transports qui sont à 98% dépendants du pétrole. Un premier challenge à relever concerne le développement de solutions pour réduire la consommation des véhicules. Il en va ainsi avec les véhicules hybrides qui couplent un moteur à combustion interne et un moteur électrique ce qui permet de considérablement réduire la consommation. D'autres solutions moins coûteuses existent sur le marché comme le "stop and start" qui coupe le moteur à combustion interne quand le véhicule est à l'arrêt.

Un deuxième challenge que doivent relever aujourd'hui les constructeurs est celui de la réduction des émissions de polluants. Ce défi fait l'objet de contraintes législatives qui deviennent de plus en plus restrictives. Par exemple, le passage de la norme EURO 5 à EURO 6 impose de fortes réductions des polluants nuisibles pour la santé (Tab. 1.1), en particulier sur les oxydes d'azote (NO_x) avec une réduction de plus de 50%.

	CO [g/km]	HC + NO _x [g/km]	NO _x [g/km]	Particules [g/km]	Date d'application
EURO 5	0.5	0.23	0.18	0.005	Septembre 2009
EURO 6	0.5	0.17	0.08	0.005	Septembre 2014

TAB. 1.1 - Régulation des émissions de polluants en place et à venir.

Le dioxyde de carbone (CO_2) est entré également dans la réglementation étant donné qu'il contribue à l'effet de serre. L'industrie des transports au niveau mondial représente 18% de son émission [58] et les constructeurs automobiles sont ainsi amenés à la réduire. Au niveau européen, ceci se traduit par le projet de régulation de 2012 qui vise à atteindre sur l'ensemble de leurs gammes une moyenne de 130 g/km de CO_2 (~ 5.6 l pour 100 km). En 2007, sur l'ensemble des constructeurs européens, l'écart moyen à cette cible correspondait à 17% (Fig. 1.1). En 2020, l'objectif à atteindre est encore plus exigeant avec

une cible de 95 g/km de CO₂.

Pour répondre aux exigences du projet de régulation et de la future norme Euro 6, plusieurs moyens sont

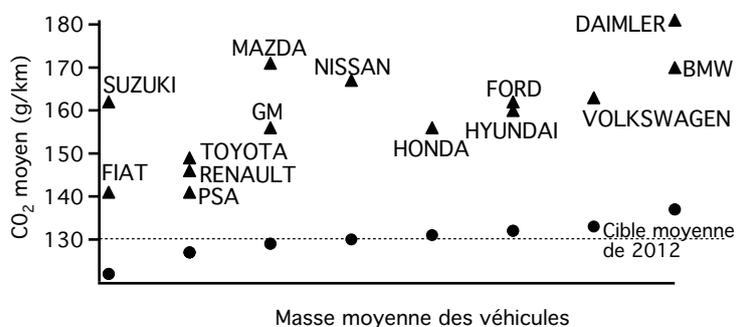


FIG. 1.1 - Emissions de CO₂ des constructeurs européens en fonction du poids moyen de leurs véhicules. (▲) Emissions de CO₂ en 2007, (●) Cibles à atteindre en 2012 en supposant que le poids moyen de la gamme de chaque constructeur ne varie pas. [153]

mis en oeuvre pour réduire les émissions de polluants et le CO₂. Une première stratégie consiste à les piéger (filtre à particules ou FAP) ou à les recycler en molécules inoffensives (traitement catalytique pour le CO, SCR ou piège à NO_x) dans la ligne d'échappement. Une deuxième solution consiste à intervenir directement à leur source (la combustion) en développant des stratégies moteurs qui utilisent des modes de combustion qui limitent leur formation. En moteur essence, la combustion d'un mélange carburé pauvre (excédant d'air par rapport au carburant) sera alors recherchée puisque ce mode de combustion ne forme pratiquement pas de CO et d'hydrocarbures imbrûlés HC. Ce mode de combustion est obtenu en moteur essence par de l'injection directe stratifiée qui mène à des écoulements stratifiés globalement pauvres. Cependant la stratification mène localement à des combustions avec de hautes températures qui accélèrent la cinétique de formation des NO_x. Pour abaisser la température de la combustion, une stratégie de recirculation des gaz brûlés ou EGR (pour *Exhaust Gas Recirculation* en anglais) consiste à diluer fortement le mélange carburé par des gaz brûlés. Ce procédé est réalisé en prélevant des gaz à l'échappement et en les réinjectant dans la ligne d'admission.

Pour le CO₂, son émission par unité d'énergie produite peut être réduite en jouant sur la nature du combustible : des carburants comme du méthane (CH₄) en comparaison à de l'isooctane (C₈H₁₈) émettent moins de CO₂ puisque le rapport d'atomes H/C est plus grand. La diminution des émissions de CO₂ passe également par la réduction de la consommation des moteurs. Une stratégie moteur essence qui va dans ce sens est la technologie de réduction de la cylindrée (*downsizing* en anglais). Elle consiste à réduire la masse des pièces mobiles pour diminuer les frottements et les transferts thermiques afin d'améliorer le rendement et, par conséquent, la consommation. Pour maintenir les puissances obtenues par de plus grandes cylindrées, cette technologie est accompagnée d'une forte suralimentation.

Même si ces stratégies permettent de réduire la consommation et de diminuer les émissions de polluants, leurs capacités doivent être exploitées au maximum puisqu'elles font face à l'augmentation constante de la masse des véhicules que ce soit pour la sécurité (Euro Ncap), le confort (l'insonorisation) ou la dépollution (Filtre à particules). En pratique, un des facteurs limitant la plage d'opérabilité de ces

stratégies essence est leur propension à générer des variations cycle à cycle (voir section 1.1) qui correspondent à une fluctuation de la combustion d'un cycle sur l'autre. Pour un point de fonctionnement donné du moteur, ces variations, si elles sont élevées, ont pour effet de dégrader le calage optimal qui est obtenu pour répondre au compromis couple mécanique développé, émissions et consommation. Cette dégradation peut alors mener à des conditions de combustion difficiles avec des ratés d'allumage, voir des combustions anormales tels que du préallumage ou du cliquetis. Le préallumage décrit une combustion qui se déclenche avant même le claquage de la bougie, ce qui conduit à de très fortes pressions cylindre et des températures très élevées entraînant par exemple une fusion des soupapes. Le cliquetis a pour origine une auto-inflammation du mélange carburé située en avant du front de flamme et intervient en fin de combustion. Il résulte en de très fortes pressions locales qui détériorent les parois de la chambre (il peut même endommager la culasse).

Les facteurs qui engendrent l'apparition de ces variations cycliques sont connus. Cependant, de par le grand nombre de phénomènes impliqués (turbulence, chimie, acoustique) et de par leurs couplages, elles sont difficiles à quantifier. L'implémentation pratique des nouvelles stratégies de combustion passe par un contrôle moteur de facteurs tel que l'avance à l'allumage pour minimiser les variations. Les marges prises par le contrôle moteur réduisent alors les gains théoriques de consommation et d'émissions de la stratégie de combustion. Pour pousser à l'extrême les nouvelles stratégies moteur pour la réduction de la consommation et des émissions de polluants, le développement d'un outil de simulation 3D capable de prédire et de quantifier les variabilités cycliques s'avère une nécessité.

Le travail de thèse présenté dans ce manuscrit s'inscrit dans ce contexte via le développement d'une méthodologie de Simulation aux Grandes Echelles (SGE) avec le code AVBP sur un moteur à allumage commandé. Dans un premier temps, cette introduction définit ce que l'on appelle des variations cycle à cycle en identifiant les quantités qui permettent de les mettre en évidence ainsi que leurs sources. Dans un second temps, un état de l'art de la modélisation des moteurs à combustion interne par SGE est présenté afin de positionner ce travail par rapport aux travaux de recherche existants. La dernière partie de cette introduction se recentre sur les objectifs de ce travail en détaillant la stratégie choisie pour y répondre.

1.1 Les variations cycle à cycle

Les variations cycle à cycle (VCC) sont une manifestation typique de la combustion en moteur à allumage commandé. Elles se caractérisent au premier ordre par des variations de la pression cylindre (Fig. 1.2) qui traduisent des variations de la propagation de la flamme d'un cycle sur l'autre. Pour un point de fonctionnement, elles dérèglent le calage optimal ce qui engendrent une surconsommation et aggravent les émissions de polluants. Le fait que les VCC soient accentuées par les stratégies de réduction d'émission de polluants rend leur prédiction de premier plan.

Différents indicateurs permettent de les appréhender [168, 113] :

- la pression moyenne indiquée (PMI) de chaque cycle (Eq. 1.1) et surtout sa covariance (Eq. 1.2) qui correspond à la variance de la PMI adimensionnée par sa valeur moyenne. Cette dernière quantifie la dispersion cyclique et par conséquent la stabilité du moteur. La valeur seuil qui distingue un point stable d'un point instable dépend du point de fonctionnement considéré, cependant un ordre de grandeur se situe à une covariance de PMI d'environ 3%. Au delà de cette valeur, les VCC sont

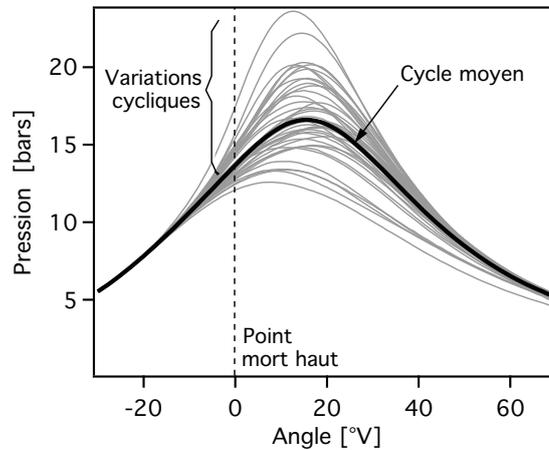


FIG. 1.2 - Exemple de VCC de la pression cylindre obtenue en moteur à allumage commandé pour un mélange fortement dilué par de l'azote à un régime de 1200 tr/min et une PMI de 3.19 bar.

trop élevées et peuvent se ressentir sur le couple mécanique. L'utilisation du moteur devient trop désagréable et la mécanique peut être endommagée. Le point de fonctionnement est alors qualifié d'instable et le moteur n'est pas commercialisable ;

$$\text{PMI} = \frac{\int_{0^{\circ}}^{720^{\circ}} P dv}{\text{Cylindrée}} \quad (1.1)$$

$$\text{COV}_{\text{PMI}} = \frac{\sigma_{\text{PMI}}}{\text{PMI}} \times 100 [\%] \quad (1.2)$$

- le degré vilebrequin $CA_{P_{\max}}$ auquel la pression cylindre est maximum permet de différencier un cycle à combustion rapide d'un cycle à combustion lente ;
- le CA_X , angle auquel un pourcentage X de la masse enfermée dans le cylindre a brûlé. Cette quantité permet d'évaluer le calage de la combustion.

Plusieurs revues ont été proposées sur les facteurs des VCC ([115, 98, 168, 113]). Ces facteurs influencent le processus de combustion et sont classiquement classés comme suit dans les revues :

- les facteurs chimiques : la richesse, le type de fuel, l'inhomogénéité du mélange, la dilution ;
- les facteurs technologiques : la géométrie de la chambre, le système d'allumage ;
- les facteurs de l'écoulement : la turbulence, les grandes structures de l'écoulement, l'écoulement à la bougie.

Les facteurs chimiques

La richesse :

Il a été montré dans les revues que la richesse a une forte influence sur les VCC car elle agit directement sur la vitesse de flamme. En effet, pour des combustions lentes, le dégagement de

chaleur arrive assez tard dans le cycle moteur, moment où la variation du volume est rapide, ce qui a pour conséquence d'augmenter les variations de la combustion. Les variations minimales interviennent donc pour des mélanges légèrement riches ou à la stoechiométrie qui correspondent à une combustion rapide, i.e. à une vitesse de flamme laminaire maximum comme le montre la Fig. 1.3. Le dégagement de chaleur se trouve ainsi phasé avec une variation de volume lente, menant à de faibles variations de pression et des pressions cylindre maximum élevées.

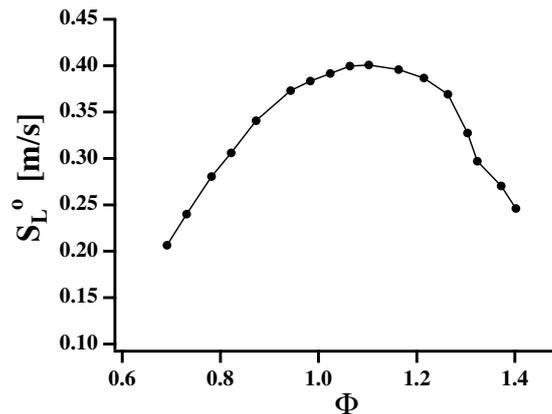


FIG. 1.3 - Evolution de la vitesse de flamme laminaire d'un mélange propane-air en fonction de la richesse pour $P = 1 \text{ bar}$ et $T = 300 \text{ K}$. [159]

Le type de fuel :

Tout facteur influençant la vitesse de propagation de la flamme est une cause possible de VCC. Certaines études font le lien entre variabilité cyclique et le type de fuel qui est utilisé. Le facteur "type de fuel" est à mettre en relation étroite avec le facteur "richesse du mélange". En effet, les VCC minimales interviennent quand la vitesse de flamme est maximale, c'est à dire proche de la stoechiométrie. La vitesse de flamme proche de cette richesse est alors caractéristique du fuel qui est utilisé.

Young [168] montre que des fuels qui brûlent plus vite ont tendance à réduire les VCC. Ceci est corroboré par les études de Brown *et al.* [21], et D'Andrea *et al.* [34]. Brown *et al.* ont testé 3 fuels différents (iso-octane, méthanol et toluène) sur une même configuration, et ils ont remarqué que le fuel possédant la plus petite vitesse de flamme (isooctane) a la covariance de la PMI la plus grande. En ce qui concerne l'étude D'Andrea, il a remarqué qu'augmenter la vitesse de flamme d'un mélange pauvre iso-octane-air par un ajout de H_2 permet de réduire la covariance de la PMI.

L'inhomogénéité du mélange :

Ce facteur a été mis en avant dans les travaux de Patterson [115] et il a été repris plus récemment par Aleiferis *et al.* [2]. Ces derniers montrent que les VCC sont très fortement corrélées à la durée du développement initial de la flamme dont la principale source de variation est apportée par le changement d'un cycle sur l'autre de la richesse globale du moteur.

Le taux de dilution :

La dilution de la charge par des EGR est le procédé le plus usuel pour limiter la formation de polluants (NO_x). Celle-ci a pour action de diminuer la température des gaz brûlés et de ralentir la

cinétique ce qui a pour effet d'abaisser la vitesse de flamme laminaire. Comme vu précédemment, ce deuxième facteur non désiré accroît les VCC. Les études de Soltau [145] et de Kuroda *et al.* [80] qui vont dans ce sens montrent qu'un ajout d'EGR mène à des combustions lentes voire à des ratés d'allumage.

Les facteurs technologiques :

La géométrie de la chambre :

La forme de la culasse : Young [167] a noté que la forme de la chambre peut influencer les VCC. Dans son étude, il compare trois chambres de géométries différentes et définit sur chacune un facteur d'ouverture de chambre. Son étude montre que plus la chambre est ouverte, moins les variabilités cycliques sont présentes. Il attribue ceci au fait que dans une chambre ouverte, la flamme peut se propager de façon sphérique plus longtemps, donc minimiser son interaction avec les parois de la chambre et ainsi limiter les extinctions locales.

La forme du piston : L'influence de la forme du piston sur les VCC a été étudiée par Lucas et Brunt [91]. Ils comparent un piston plat, un piston avec un bol et le piston de la chambre de May dont le piston possède des cavités pour les têtes de soupapes. Ces cavités de soupapes induisent un fort mouvement de swirl non présent pour les autres géométries qui permet de réduire le temps de combustion de 20% comparé à une chambre avec piston plat ayant le même facteur de compression. Cette diminution de la durée de la combustion s'accompagne d'une réduction de 47% des variations du maximum de pression.

L'allumage :

Le système d'allumage est un facteur important dans la génération de VCC [117]. Les électrodes sont un facteur de variations puisque leur épaisseur ainsi que l'écart inter-électrodes déterminent les pertes thermiques de la flamme à la bougie, soit une croissance plus ou moins rapide. Il a été également montré que l'énergie, la position de la bougie et le nombre de sources d'allumage ont un effet notable sur la réussite et la durée de l'initiation de flamme [96].

Il semble également naturel d'envisager que ces VCC proviennent non seulement de la bougie mais aussi des caractéristiques de l'écoulement près de la bougie comme la richesse et la vitesse de l'écoulement [68].

La dynamique de l'écoulement :

Ces variations de vitesse (direction et intensité) proviennent des grandes structures de l'écoulement décrites ci-dessous.

Le Swirl :

Le swirl peut être défini comme une rotation d'ensemble autour de l'axe du cylindre comme le montre la Fig. 1.4(a). Un des avantages de ce mouvement d'ensemble est d'accélérer le processus de combustion [59], et donc de réduire les VCC. Cependant, les pertes de charge induites dans les tubulures pour générer ce mouvement réduisent l'efficacité volumétrique, ce qui est un désavantage majeur [150].

Le Tumble :

Ce mouvement est le plus courant en moteur essence. Il s'agit d'une rotation autour d'un axe perpendiculaire au mouvement du piston (Fig. 1.4(b)). Ce mouvement réduit également l'efficacité volumétrique des conduits, cependant il améliore considérablement la combustion. En effet, dans la phase de compression l'intensité du tumble augmente par conservation du moment angulaire, puis avec la diminution du volume, le tumble se désintègre vers le point mort haut (PMH). Cette explosion donne lieu à une forte énergie turbulente au moment de l'allumage et pendant la phase de propagation qui plisse la flamme et augmente ainsi sa vitesse de consommation.

Une forte intensité de tumble permet également de diminuer les VCC en réduisant l'inhomogénéité du mélange à la bougie comme l'a montré l'étude de Fisher *et al.* [44].

Le Squish :

La dernière grande structure de l'écoulement que l'on peut distinguer est le squish présenté en Fig 1.4(c). Il correspond à une chasse des gaz des bords du cylindre vers l'intérieur en fin de compression. Cet effet de chasse augmente la turbulence vers le PMH ce qui accélère la propagation de la flamme. Il agit également sur le centrage du mouvement de tumble ce qui peut diminuer les VCC.

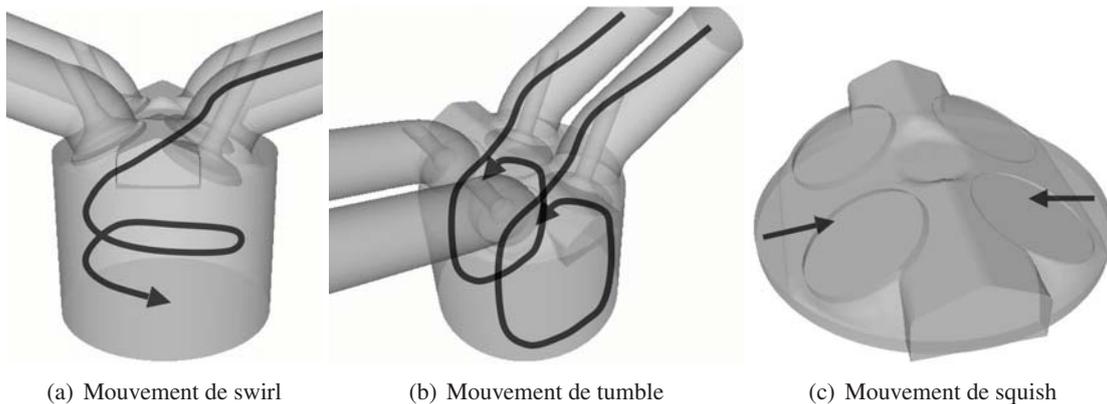


FIG. 1.4 - Représentation schématique de l'aérodynamique typique rencontrée dans un moteur.

Ces différents facteurs de VCC peuvent être regroupés suivant la phase de combustion qu'ils affectent [113]. Le processus de combustion alors est divisé en trois phases :

1. l'allumage ;
2. le développement du noyau d'allumage ;
3. la propagation turbulente de la flamme.

A chacune de ces étapes, les facteurs cités précédemment peuvent participer dans leur bon déroulement ou éventuellement contribuer à la dispersion cyclique. Ceci est illustré par la Tab. 1.2.

Facteurs de VCC		Allumage	Développement du noyau		Propagation turbulente (Vitesse de consommation)
			Convection	Taux de croissance	
Chimiques :	Richesse	-	-	●	●
	Type de fuel	-	-	●	●
	Inhomogénéité du mélange	-	-	●	-
	Taux de dilution	-	-	●	●
Technologiques :	Forme de la culasse	●	●	●	●
	Forme du piston	●	●	●	●
	Système d'allumage	●	-	●	-
Écoulement :	Tumble	●	●	-	●
	Swirl	●	●	-	●
	Squish	-	-	-	●

TAB. 1.2 - Résumé des facteurs de VCC en fonction de la phase de combustion qu'ils affectent [113].

1.2 Etat de l'art en SGE de moteurs automobiles

La simulation RANS (*Reynolds Averaged Navier-Stokes* en anglais) est à ce jour l'approche de référence en industrie pour étudier la combustion des moteurs à combustion interne. Cette méthode permet de décrire le cycle moteur moyen et permet par exemple de comparer l'impact de la géométrie sur l'écoulement interne et ainsi d'optimiser son design. Cependant, cette description moyenne de l'écoulement ne permet pas d'étudier les VCC. Avec l'augmentation des puissances de calcul depuis les dix dernières années, les simulations SGE ont commencé à être réalisées sur des géométries de moteurs à combustion interne. Ces méthodes résolvent un écoulement instantané filtré (voir section 3) où les grandes structures de l'écoulement sont résolues suivant le maillage. De par sa résolution d'un champ instantané, la SGE permet de simuler des cycles moteur individuels et permet ainsi d'envisager la prédiction des VCC. En géométries complexes, la SGE a déjà fait ses preuves comme sur des simulations de turbines à gaz [16]. En moteur à piston, ce n'est pas encore le cas puisque des difficultés supplémentaires viennent se rajouter à la modélisation de l'écoulement. La première qui n'est pas la moindre est la gestion d'une géométrie mobile. Deux méthodes numériques distinctes peuvent alors être utilisées : une méthode ALE (pour *Arbitrary Lagrangian Eulerian* en anglais) ou une méthode de frontières immergées ou IB (*Immersed Boundaries* en anglais). La méthode ALE (voir section 4.5) est utilisée avec un maillage qui épouse la déformation de la géométrie alors que la méthode IB permet de s'affranchir de la difficulté de la génération du maillage. Cette dernière méthode est appliquée sur une grille fixe où les mouvements des surfaces de la géométrie sont modélisées via des termes sources volumiques dans l'équation de quantité de mouvement. Un autre point de modélisation délicat en moteur à piston est la simulation d'un transitoire où la flamme ne fait que croître à chaque instant, contrairement aux turbines à gaz où un état stationnaire est atteint dans la position de la flamme. Ainsi pour retrouver le comportement du moteur, le timing de la combustion doit être parfaitement prédit.

Pour présenter ce qui a été réalisé jusqu'à présent en SGE de moteur à combustion interne en géométrie mobile, les principales études sont scindées en deux parties : les SGE sans combustion et les SGE

avec combustion. Les paramètres numériques de ces études sont résumés à la fin de cette section dans la Tab. 1.3. Pour toutes ces études deux stratégies de SGE émergent. La première est une approche que l'on qualifiera d'approche "multi-cycles" qui consiste à simuler plusieurs cycles consécutifs. La seconde, qualifiée d'approche "cycles indépendants", consiste à simuler plusieurs cycles découplés les uns des autres où chaque cycle est perturbé initialement sur la quantité imposée en condition limite ou sur le champ initial.

Simulations de moteurs entraînés (sans combustion)

Une des premières applications SGE (sans combustion) sur géométrie mobile de moteur à piston a été réalisée par Haworth [56, 57]. Dans cette étude, l'auteur souligne l'apport de la SGE par rapport à une modélisation RANS si certains pré-requis sont respectés tels que des méthodes numériques très précises et non-dissipatives, et des conditions aux limites proprement définies. Pour ce dernier point, il indique qu'il faut éviter de placer des conditions limites au niveau des pipes d'admission et d'échappement où la direction de l'écoulement alterne avec de fortes intensités. Enfin il insiste sur la nécessité de valider la SGE à des mesures expérimentales sur les moments du premier et deuxième ordre. En SGE, ces statistiques de l'écoulement sont obtenues par une approche multi-cycles, approche qui présente l'avantage d'éviter une pollution de la condition initiale souvent fixée arbitrairement. Dans ces deux articles, Haworth teste l'approche multi-cycles sur une configuration mobile de moteur simplifiée : il s'agit d'un moteur axi-symétrique 2 temps avec une soupape centrale à levée fixe, moteur étudié expérimentalement par Morse *et al.* [104]. La SGE a été menée sur quatre cycles, et les statistiques obtenues sur la vitesse par une moyenne d'ensemble des trois derniers cycles montrent des résultats meilleurs que toutes les études RANS publiées sur cette configuration. Ce travail rapporte également la capacité de la SGE, sur une configuration plus réaliste de moteur entraîné 4 temps à deux soupapes, de capturer des VCC de la dynamique dans le cylindre. Cependant, ces VCC de vitesse n'ont pas été confrontées à celles observées expérimentalement.

La configuration de Morse *et al.* a été reprise en SGE par Verzicco *et al.* [162]. Par rapport à l'étude précédente, la principale différence se situe au niveau de la méthode numérique qui modélise le mouvement du piston : une méthode IB (*Immersed Boundaries*) est utilisée. Les résultats obtenus sont meilleurs que ceux de Haworth et Jansen [57], toutefois les études ne sont pas directement comparables puisque la résolution du maillage utilisée par Verzicco est 2.5 fois plus importante.

Les travaux de Naitoh *et al.* s'affranchissent également de la difficulté de génération de maillages en configuration mobile. Pour ce faire, ils appliquent une méthode IB de type "cut-cell" où un seul maillage cartésien fixe est utilisé pour modéliser le cycle moteur en SGE. La faisabilité de cette approche est tout d'abord démontrée sur une chambre de type "pancake" (tête de culasse et piston plats) où 5 cycles consécutifs sont simulés [110]. Dans une autre étude [109], une configuration plus réaliste de moteurs 4 soupapes a également été réalisée.

La revue de Celik *et al.* [23] présente des recommandations sur l'utilisation de la SGE en moteur à combustion interne. Deux points recourent celles décrites par Haworth :

- la précision numérique : un schéma d'une précision minimum du second ordre peut être utilisé si le maillage ne présente pas des facteurs d'étirement importants avec le mouvement de la géométrie ;
- le recours à plusieurs cycles consécutifs est nécessaire pour éviter une pollution de la condition

initiale.

Dans ce papier, des SGE faites dans de véritables moteurs sont également présentées. Hormis l'étude de Haworth, Celik présente des simulations effectuées avec le code KIVA sur une géométrie simplifiée de moteur où le piston présente un bol et le toit de culasse est plat. Seulement deux cycles ont été réalisés et les résultats n'ont pas été confrontés à des mesures expérimentales. Il reporte également une simulation à froid de moteur diesel deux soupapes où les résultats ne peuvent être comparés aux mesures expérimentales puisque la géométrie n'est pas exactement celle des essais. Il souligne ainsi le besoin de données expérimentales fiables et détaillées pour valider la SGE.

Une étude qui confronte des résultats SGE à des mesures expérimentales est celle de Moureau *et al.* [108, 106]. Il s'agit de la configuration très simplifiée du moteur à piston carré de l'IMFT [17] qui a été conçue pour étudier la compression et l'éclatement du tumble qui prend place en moteur à allumage commandé. La modélisation adoptée par Moureau s'est orientée vers une méthode ALE associée à un maillage hybride (tétraèdre/prisme/hexaèdre). Ce choix sur le type d'élément rompt avec ce qui est classiquement utilisé en configuration de moteur à piston (hexaèdres). Cependant, les résultats moyens SGE, obtenus sur 6 cycles consécutifs, montrent une reproduction encourageante des profils moyens issus des mesures PIV (*Particle Image Velocimetry* en anglais).

Cette configuration expérimentale de l'IMFT a été reprise plus récemment par Toledo *et al.* [157] avec une approche "cycles indépendants". Dans cette étude, les cycles sont différenciés par un champ initial perturbé aléatoirement. La moyenne de 10 cycles SGE montre un bon accord avec les résultats expérimentaux de vitesse. Cependant l'auteur souligne que la trajectoire du centre du tumble en fin de compression est très sensible aux conditions initiales qui sont, de par l'approche choisie, fixées arbitrairement.

Cette configuration a également été simulée par Hasse *et al.* [53] avec une approche DES (*Detached Eddy Simulation* en anglais) qui consiste à utiliser un modèle RANS SST pour la région proche paroi et un modèle de Smagorinsky pour la partie intérieure du domaine. Les moyennes d'ensemble réalisées sur 10 cycles consécutifs montrent un bon accord avec l'expérience sur les profils de vitesse moyenne, résultats qui sont comparables à la SGE de Moureau [106].

Tout dernièrement, cette approche DES a été reprise par Hasse sur une configuration plus réaliste de moteur à allumage commandé à froid [54] sur laquelle 13 cycles consécutifs ont été simulés. Ce travail met en avant les VCC de vitesse capturées par la DES à la position de la bougie qui dans une simulation avec combustion pourraient résulter en des VCC de propagation de la flamme. La confrontation des statistiques SGE aux mesures expérimentales ne sont cependant pas très convaincantes. Une explication probable à ces résultats est le maillage hybride (tétraèdre/prisme) utilisé qui présente des déraffinements assez brusques avec des rapports de volumes entre éléments consécutifs élevés.

Dugué *et al.* [41] ont simulé avec le code Star-CD un diesel monocylindre étudiée expérimentalement par Deslandes [36]. La simulation est effectuée avec une méthode ALE et le modèle standard de Smagorinsky. Le domaine de calcul, modélisé par des hexaèdres d'une taille inférieure au millimètre, inclut la géométrie entière du banc en s'étendant du plenum d'admission au plenum d'échappement. 10 cycles consécutifs ont été simulés et leurs statistiques sur la vitesse (moyenne et fluctuations) sont comparées à des résultats RANS et aux mesures PIV des essais. La moyenne SGE montre une structure du swirl similaire à celle de l'expérience et du calcul RANS. Les niveaux des fluctuations SGE sont cependant deux fois moins importants que ceux observés expérimentalement. L'auteur souligne deux points qui peuvent expliquer ces variations de vitesse moindres :

- un nombre de cycles différents entre la SGE (10 cycles) et l'expérience (300 cycles) qui biaise la comparaison des statistiques ;
- le deuxième point concerne l'acoustique des conduits d'admission et d'échappement. Dans leur simulation, elle n'est pas prise en compte alors que c'est une source potentielle de VCC puisqu'elle influence le remplissage.

Sur le premier point, un élément de réponse est apporté par les études de Goryntsev *et al.* [50, 51]. L'auteur affirme que 25 cycles SGE sont suffisants pour obtenir une vitesse moyenne convergée alors que 50 cycles doivent être simulés pour avoir une bonne prédiction des fluctuations cycle à cycle. Les 50 cycles SGE ont été menés sur un moteur 4 temps à injection directe essence à l'aide du code KIVA-3V. Une méthode ALE et un modèle standard de Smagorinsky sont employés. Dans ces travaux, l'écoulement est modélisé par deux approches différentes : une simulation monophasique pour évaluer les VCC de vitesse dues à l'admission d'air, et une simulation diphasique pour quantifier l'impact du spray d'essence sur ces VCC. La modélisation monophasique montre que relativement à la valeur moyenne de la vitesse, les fluctuations les plus grandes sont atteintes pendant la phase de compression avec une valeur maximale située au centre du mouvement de tumble. La simulation diphasique montre que l'injection perturbe fortement la structure du tumble observée pour la SGE monophasique. Les VCC maximales de vitesse sont alors atteintes à l'extrémité du jet et s'accroissent fortement quand le jet atteint le centre du tumble. Ces variations de vitesses sont fortement corrélées aux VCC du mélange.

Cette configuration de moteur à injection directe essence a également été simulée par Adomeit *et al.* [1] en diphasique avec le code Star-CD. Dans cette étude, l'approche de "cycles indépendants" est utilisée avec 10 cycles moteur partiels uniquement simulés du début de l'admission à l'instant d'allumage. Tous les cycles débutent avec la même solution initiale, ils diffèrent uniquement par les signaux de pression imposés en entrée du conduit d'admission. Des différences de quelques millibars sur ces signaux suffisent à induire des VCC sur la dynamique et le mélange. Cette étude confirme ainsi que l'acoustique doit être prise en compte dans la SGE pour capturer les VCC d'un moteur à combustion interne.

Simulations avec combustion

Les simulations menées par Rutland font partie des premières études de SGE réactives : Lee *et al.* [87] présentent une SGE d'un monocylindre diesel. Le modèle de combustion utilisé considère une pondération entre une combustion prémélangée et une combustion non-prémélangée où la fraction massique des espèces est déterminée par une fonction densité de probabilité. Dans cette simulation, seulement un sixième de la chambre est modélisée et seules les phases de compression, combustion et détente sont simulées pour 1 cycle. Les résultats montrent un très bon accord à la pression cylindre expérimentale. Le même moteur a été simulé par Hu et Rutland [62]. Le maillage reste identique et le cycle SGE n'est également simulé que partiellement. Seul le modèle de combustion change. Il s'agit d'un modèle qui ne considère que la combustion par diffusion et qui est basé sur une approche à fonction densité de probabilité pour les fractions massiques couplée à de la tabulation de flamme stationnaire de diffusion. En terme de résultats, seules des comparaisons sur la pression cylindre et le taux de réaction sont présentées avec un bon accord entre l'expérience et la SGE.

Jhavar et Rutland [67], à la différence des deux études précédentes, ont réalisé la SGE sur la chambre diesel complète et sur le cycle moteur en entier. Entre les deux cycles consécutifs simulés, ils observent

des VCC spatiales sur le ratio carburant-oxygène. Cependant, ils reconnaissent que le premier cycle est biaisé par la condition initiale et que plus de cycles doivent être simulés.

Thobois *et al.* [156] ont également réalisé une simulation multi-cycles sur une configuration réaliste de moteur 4 soupapes à allumages commandé. Quatre cycles consécutifs ont été simulés sur une configuration à tubulures courtes. Sur chaque tubulure la pression est imposée via des conditions limites NSCBC (voir section 3.4.1). Le modèle de combustion utilisé est le modèle de flamme épaissie [30], et la turbulence de sous-maille est modélisée par un Smagorinsky standard. L'allumage est modélisé par un terme source volumique sur l'équation de l'énergie. Ce travail montre que la pression cylindre issue de la SGE varie d'un cycle sur l'autre tout en restant dans l'enveloppe expérimentale. Comme pour Jhavar et Rutland, les variations des premiers cycles sont sûrement liées à un biais de la condition initiale. Néanmoins, il est montré que la structure de la flamme, en forte interaction avec la turbulence, varie au cours des cycles.

La même configuration a également été simulée par Richard et Vermorel [126, 160] avec le même code (AVBP). Par rapport à la configuration numérique de Thobois *et al.* [156], les différences se situent au niveau de la modélisation de la combustion turbulente (modèle CFM-LES [127]) et de l'allumage (AKTIM [38]). Les conditions limites sont imposées sur des tubulures courtes et ils notent que cette solution ne permet sûrement pas de capturer une acoustique similaire à celle de l'expérience. Cependant, le point de fonctionnement simulé est faiblement chargé et l'acoustique a alors peu d'influence selon les auteurs. Dans cette étude, 10 cycles consécutifs ont été réalisés, et ils montrent que leur modélisation est capable de prédire des VCC du même ordre que celles trouvées dans l'expérience sur la pression cylindre. Ils ne se contentent pas seulement de faire le constat des variabilités mais ils essayent d'en étudier les causes. Ils montrent notamment, que pour leur point de fonctionnement, l'intensité turbulente à la bougie, issue de l'explosion du tumble au PMH combustion, est la principale cause de variations du développement de la flamme d'un cycle sur l'autre.

Écoulement	Références	Approche des cycles moteur		Modélisation numérique			Maillage	
		Consécutifs	Indépendants	Schéma	Déformation maillage	SGS	C.L.	Type
Monophasique	Haworth [56, 57]	● (4-5)	-	espace : 2 ^{eme} ordre décentré temps : 2 ^{eme} ordre	ALE	Smagorinsky et Smagorinsky dyn. lagrangien	-	Hexa
	Verzicco <i>et al.</i> [162]	● (5)	-	espace : 2 ^{eme} ordre centré temps : R-K 3 ^{eme} ordre explicite	IB	Smagorinsky dyn.	-	Hexa
	Celik <i>et al.</i> [23]	● (2)	-	espace : 2 ^{eme} ordre décentré temps : 1 ^{er} ordre explicite	ALE	Smagorinsky	-	Hexa
	Naitoh <i>et al.</i> [110, 109]	● (5-1)	-	espace : 3 ^{eme} ordre décentré temps : -	IB : "cut-cell"	-	-	Hexa
	Moureau <i>et al.</i> [108, 106]	● (6)	-	espace : 2 ^{eme} ordre centré temps : 2 ^{eme} ordre explicite	ALE	Smagorinsky	- Loi de Paroi	Tétra + Prisme + Hexa
	Dugué <i>et al.</i> [41]	● (10)	-	espace : 2 ^{eme} ordre (MARS) temps : 1 ^{er} ordre implicite	ALE	Smagorinsky	Pressions plenums Loi de paroi	Hexa
	Toledo <i>et al.</i> [157]	-	● (10)	espace : 2 ^{eme} ordre centré temps : R-K 4 ^{eme} ordre explicite	ALE	Smagorinsky	Vitesse conduit Murs non-glissants	Tétra
	Hasse <i>et al.</i> [53]	● (10)	-	espace : 2 ^{eme} ordre centré temps : 2 ^{eme} ordre implicite	ALE	DES : LES = Smagorinsky + RANS = SST, Menter	- Murs non-glissants	Hexa
	Hasse <i>et al.</i> [54]	● (13)	-	espace : 2 ^{eme} ordre centré temps : 2 ^{eme} ordre implicite	ALE	DES : LES = Smagorinsky + RANS = SST, Menter	Pressions conduits	Tétra + Prisme
Diphasique	Adomeit <i>et al.</i> [1]	-	● (10 : Admission - Compression)	-	ALE	Smagorinsky	Pression	Hexa
	Goryntsev <i>et al.</i> [50, 51]	-	● (50)	espace : 1 ^{er} ordre décentré (PDC) temps : 1 ^{er} ordre explicite	ALE	Smagorinsky	Pressions conduits Murs non-glissants	Hexa
Monophasique réactif	Thobois <i>et al.</i> [156]	● (4)	-	espace : 2 ^{eme} ordre centré temps : 2 ^{eme} ordre explicite	ALE	Smagorinsky	Pressions conduits Loi de paroi	Hexa
	Richard <i>et al.</i> [126] Vermorel <i>et al.</i> [160]	● (10)	-	espace : 2 ^{eme} ordre centré temps : 2 ^{eme} ordre explicite	ALE	Smagorinsky	Pressions conduits Loi de paroi	Hexa
Diphasique réactif	Lee <i>et al.</i> [87]	-	● (1 : Compression-Détente)	-	ALE	modèle à 1 équation	-	Hexa
	Jhavar et Rutland [67]	● (2)	-	espace : 2 ^{eme} ordre décentré temps : 1 ^{er} ordre explicite	ALE	LEM [100] et modèle à 1 équation	Pressions conduits Loi de paroi	Hexa
	Hu et Rutland [62]	-	● (1 : Compression-Détente)	-	ALE	modèle à 1 équation	-	Hexa

TAB. 1.3 - Liste des principaux travaux sur la modélisation SGE en géométrie mobile de moteur à combustion interne. Travaux classés suivant le type d'écoulement traité (réactif ou non-réactif, monophasique ou diphasique) et la méthode numérique retenue.

1.3 Objectifs de l'étude et choix méthodologiques

La section 1.1 a répertorié les facteurs pouvant engendrer des VCC. Dans un moteur à allumage commandé, ces derniers sont couplés ce qui rend difficile la prédiction des variations. En complément aux bancs d'essais expérimentaux qui ne sont pas très aisés à mettre en place dans une chambre de moteur à piston avec écoulement réactif, il semble alors intéressant d'avoir recours à un outil numérique 3D capable de prendre en compte les phénomènes physiques (combustion, turbulence) supposés à la source des facteurs de VCC. La section 1.2 a prouvé que la SGE est une voie prometteuse puisque, de par son caractère intrinsèquement instationnaire, elle est capable à travers une approche multi-cycles de capturer des variations de la dynamique de l'écoulement et du développement de la flamme. Les études mettent cependant en évidence le manque de données expérimentales pour valider l'amplitude des variations prédites dans les SGE de moteurs à combustion interne réalistes.

1.3.1 Contexte du travail

Le projet ANR-PREDIT SGEmac s'inscrit dans ce cadre de validation de la SGE comme outil de prédiction des VCC. Une base de données de référence a ainsi été acquise sur un banc moteur monocylindre à allumage commandé se situant à l'Institut Français du Pétrole. Ce moteur de conception récente (moteur F7P conçu par Renault) permet grâce à des hublots et un cylindre transparent (uniquement quand le moteur est opéré sans combustion) l'utilisation de diagnostics optiques. Les points de fonctionnement ont été acquis par C. Lacour pour deux modes du moteur : un mode en injection indirecte (IIE) opéré avec du propane qui mène à un mélange homogène dans la chambre, et un mode en injection directe (IDE) homogène alimenté par de l'isooctane via un injecteur piézo-électrique. Ce travail se concentre uniquement sur les cas IIE car l'IDE ajoute des difficultés supplémentaires par la modélisation d'un écoulement diphasique avec la prise en compte du spray d'essence. La Tab 1.4 résume les divers points de fonctionnements acquis en IIE. Il est à noter que pour chacun de ces points, leur pendant en moteur entraîné (sans combustion), où seul de l'air est admis, a été caractérisé expérimentalement.

1.3.2 Objectifs de l'étude et stratégies

L'objectif de ces travaux est d'établir une méthodologie SGE avec et sans combustion pour simuler le banc moteur en IIE, de la valider et de confronter les variabilités de la simulation aux mesures expérimentales.

Dans le projet SGEmac, deux approches SGE multi-cycles sont développées pour prédire les VCC :

- la première qualifiée d'approche 3D pure, développée par le CERFACS, consiste à simuler entièrement le banc expérimental par SGE ;
- la seconde, développée à l'IFP, est une approche de couplage 1D/3D : seule la chambre de combustion et une partie des conduits d'admission et d'échappement y attendant sont simulées avec le code SGE (3D). L'écoulement dans le reste du moteur est simulé par un code 1D qui va fournir les

	Points	Φ [-]	Dilution N_2 [%]	Avance à l'allumage (AVA) [°V]	Vitesse de rotation [tr/min]	PMI [bar]	COV_{PMI} %
Points stables	<i>stab_ref</i>	1	0	20 (optimum)	1200	2.97	1.12
	<i>stab_aa-</i>	1	0	12 (retard)	1200	2.91	1.9
	<i>stab_aa+</i>	1	0	28 (avance)	1200	2.96	1.25
	<i>stab_rpm</i>	1	0	26 (optimum)	1800	2.7	1.22
	<i>stab_pmi</i>	1	0	16 (optimum)	1200	4.56	0.94
Points instables	<i>instab_dil</i>	1	32.8	50	1200	3.19	7.61
	<i>instab_for</i>	1	0	28	1200	2.99	1.77
	<i>instab_pauvre</i>	0.59	0	52	1200	3.36	8.91

TAB. 1.4 - Points stables et instables du banc moteur F7P en mode IIE.

conditions aux limites pour le code 3D.

Pour chacune de ces approches, le choix du code SGE s'est orienté vers le code AVBP dont le développement est réalisé conjointement par le CERFACS et l'IFP. Ce code a déjà fait l'objet de plusieurs applications en combustion turbulente de géométries complexes [16, 129], et a également démontré son potentiel à reproduire des variabilités cycliques sur la géométrie XU10 de moteur à allumage commandé [156, 126, 160] lors du projet européen LESSCO2.

Ce travail de thèse consiste à développer l'approche 3D pure en reprenant l'approche multi-cycles développée dans la thèse de L. Thobois [155] pour reproduire les instabilités cycliques observées expérimentalement. Le mélange est modélisé par une approche multi-espèces des propriétés thermodynamique. La réaction chimique est représentée par une cinétique chimique simplifiée et l'interaction flamme-turbulence est modélisée par une flamme épaissie dynamique. L'allumage est mimé par un dépôt d'énergie. Pour consolider cette approche quatre points sont à envisager :

1. une stratégie de maillage pour réaliser la simulation du banc moteur quasi-complet ;
2. des conditions aux limites adaptées pour capturer l'acoustique des lignes ;
3. une cinétique chimique propane-air valable pour les conditions thermodynamiques rencontrées en moteur ;
4. une validation du modèle d'allumage.

Le premier point fait l'objet d'une validation (chapitre 7) sur une configuration simplifiée de moteur à piston : le moteur entraîné de Morse *et al.* [104]. Par la suite (chapitre 8), cette méthodologie est également testée sur une configuration plus réaliste de moteur en intégrant le deuxième point sur le traitement des conditions aux limites. Il s'agit du calcul d'un point de fonctionnement entraîné (*stab_ref* sans combustion) du banc moteur F7P pour lequel la dynamique de l'écoulement dans le cylindre est caractérisée (moyenne et fluctuations). La cinétique chimique propane-air est définie et validée sur des flammes 1D laminaires par rapport à des données expérimentales de la littérature et des mécanismes complexes (chapitre 5). En parallèle, le modèle de dépôt d'énergie développé par L. Thobois est validé sur l'expérience de Renou [124] (chapitre 6). En écoulement laminaire, l'allumage par bougie du mélange propane-air de

cette expérience conduit à la formation d'une flamme sphérique laminaire dont l'expansion est caractérisée.

La simulation de deux calculs avec combustion (un point stable *stab_ref* et un autre instable *instab_dil*) du banc F7P permet d'intégrer ces quatre points et de valider la modélisation de la combustion (chapitre 9). Ces deux calculs permettent également de voir si la SGE est capable de reproduire les VCC pour un fonctionnement donné du moteur et de différencier un point stable d'un autre instable (chapitre 10).

1.4 Organisation du manuscrit

La première partie décrit les approches théorique et numérique employées pendant cette thèse. Les équations de conservation pour une phase gazeuse sont présentées dans un contexte d'écoulements compressibles et réactifs (chapitre 2). Ces équations sont ensuite filtrées au chapitre 3 pour aboutir aux relations SGE avec une présentation des termes non résolus et de leurs fermetures. Le chapitre 4 présente une description générale de l'approche numérique. Dans ce chapitre, la méthode numérique de capture de choc avec des schémas centrés est présentée et testée sur une configuration de soupape à très faible levée. Le schéma cinétique réduit développé pour une combustion propane-air à la stoechiométrie est ensuite validé au chapitre 5, et le chapitre 6 teste le comportement du modèle de dépôt d'énergie sur des cas 1D et le valide sur un cas 3D. Le couplage du modèle d'allumage au modèle de combustion turbulente est enfin décrit.

La deuxième partie présente les méthodologies de maillage et numérique utilisées pour simuler le banc moteur F7P. Leurs validations sont réalisées à travers deux cas moteur. Le premier cas, présenté au chapitre 7, considère une géométrie simplifiée de moteur pour évaluer l'utilisation de maillages tétraédriques en maillage mobile. Le chapitre 8 présente le deuxième cas qui correspond au point *stab_ref* sans combustion du banc moteur F7P. Ce test permet d'évaluer la stratégie numérique mise en place pour l'approche 3D pure.

La troisième partie est consacrée à la simulation de deux points de fonctionnement avec combustion du banc moteur. Le but de cette partie est dans un premier temps de rassembler les différents aspects validés dans les parties précédentes. Pour ce faire, un fonctionnement stable (*stab_ref*) du moteur F7P a été choisi en y rajoutant la modélisation de la combustion (chapitre 9). La propagation de la flamme est alors validée et les sources potentielles de VCC sont analysées. La capacité de la méthodologie adoptée à distinguer un point stable d'un point instable est mise en perspective en modélisant au chapitre 10 le point de fonctionnement *instab_dil* (cf. Tab. 1.4) de la base de données SGEmac.

Première partie

**Equations et modèles pour les écoulements
gazeux réactifs**

Table des matières

2	Equations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs	35
2.1	Équations et variables conservatives	35
2.2	Variables thermodynamiques	37
2.3	Équation d'état des gaz parfaits	37
2.4	Diffusion moléculaire multi-espèces	38
2.5	Diffusion de la chaleur	39
2.6	Coefficients de transport diffusif	39
2.7	Cinétique chimique	40
3	Equations pour la SGE réactive	43
3.1	Équations SGE	44
3.1.1	Filtrage SGE des équations de Navier-Stokes	44
3.1.2	Flux convectifs résolus	45
3.1.3	Flux diffusifs résolus	45
3.1.4	Termes de sous-maille	46
3.2	Modèles de sous-maille	47
3.3	Modèle de combustion turbulente	49
3.3.1	Flamme laminaire épaissie (TF)	49
3.3.2	Modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente (TFLES)	50
	Fonction d'efficacité E	51
	Estimation de la constante α	53
3.3.3	Modèle de flamme épaissie dynamique (DTFLES)	53
	Principe de fonctionnement	53
	Facteur d'épaississement dépendant de la résolution locale	55
3.4	Modélisation des frontières du domaine de calcul	55
3.4.1	Les conditions caractéristiques	55
3.4.2	Les lois de paroi	57

4	Approche numérique	61
4.1	Discrétisation du domaine : <i>une approche Cell-Vertex</i>	61
4.2	Schémas numériques	63
4.3	Avancement en temps	64
4.4	Viscosité artificielle	65
4.5	Maillage mobile : une méthode ALE	66
4.6	Traitement des chocs	69
4.6.1	Problématique	70
4.6.2	Les méthodes de capture de choc d'AVBP	71
4.6.3	Application des deux méthodes au tube à choc	72
4.6.4	Calcul d'une soupape ouverte à très faible levée	75
5	Cinétique chimique à 2 étapes propane-air	79
5.1	Données disponibles	80
5.1.1	Les données expérimentales	80
5.1.2	Les mécanismes détaillés	81
5.2	Le mécanisme réduit	83
5.2.1	Effet de la pression sur la vitesse de flamme	84
5.2.2	Validation du mécanisme à 2 étapes sans dilution	84
	Vitesse de flamme laminaire	85
	Température de flamme adiabatique	85
	Épaisseur de flamme laminaire	86
	Délai d'allumage	86
5.2.3	Effet de la dilution	87
	Dilution par des gaz brûlés	89
	Dilution par de l'azote	89
5.3	Utilisation du mécanisme à 2 étapes dans AVBP	90
	Structure de la flamme prémélangée en DNS	92
	Chimie et modèle de flamme épaissie en SGE	92
5.4	Conclusion	95
6	Modélisation de l'allumage : le modèle ED (<i>Energy Deposition</i>)	97
6.1	Physique d'un allumage par bougie	98
6.2	Description du modèle de dépôt d'énergie	99
6.3	Tests de validation en DNS	100
6.3.1	Le modèle d'allumage ED en 1D	100
	Description du cas test	100
	Résultats	101
6.3.2	Le modèle d'allumage ED en DNS	102

	Description du cas 3D	103
	Résultats	105
6.4	Le modèle d'allumage ED en SGE	108
6.4.1	Couplage du modèle de combustion avec le modèle ED	108
6.4.2	Influence de la résolution du dépôt	110
6.5	Conclusion sur le modèle d'allumage par dépôt d'énergie	112

Equations de conservation pour les écoulements gazeux réactifs

Cette section présente les équations de conservation dites de Navier-Stokes établies pour des mélanges gazeux compressibles et réactifs, ainsi que les différents modèles et hypothèses concernant la thermodynamique, la diffusion et la cinétique réactionnelle dans le code AVBP.

2.1 Équations et variables conservatives

Les équations de conservation d'un écoulement multi-espèces réactif s'écrivent sous la forme suivante :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{s}_c \quad (2.1)$$

$\mathbf{w} = (\rho u_1, \rho u_2, \rho u_3, \rho E, \rho_k)^T$ est le vecteur des variables conservatives transportées avec respectivement ρ , u_1 , u_2 , u_3 , E et ρ_k , la masse volumique, les trois composantes du vecteur vitesse $\mathbf{u} = (u_1, u_2, u_3)^T$, $E = E_i + \frac{1}{2}\mathbf{u}\mathbf{u}$ l'énergie totale non chimique (E_i est l'énergie interne) et $\rho_k = \rho Y_k$ avec Y_k la fraction massique de l'espèce k , k variant de 1 à N , N étant le nombre d'espèces. \mathbf{F} est le tenseur des flux que l'on décompose de façon classique en une partie non visqueuse et une partie visqueuse :

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^I(\mathbf{w}) + \mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w}) \quad (2.2)$$

\mathbf{s}_c est le terme source lié à la réaction chimique (cf. section 2.7).

Les trois composantes du tenseur des flux non visqueux $\mathbf{F}^I(\mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\mathbf{f}^I = \begin{pmatrix} \rho u_1^2 + P \\ \rho u_1 u_2 \\ \rho u_1 u_3 \\ (\rho E + P)u_1 \\ \rho_k u_1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{g}^I = \begin{pmatrix} \rho u_1 u_2 \\ \rho u_2^2 + P \\ \rho u_2 u_3 \\ (\rho E + P)u_2 \\ \rho_k u_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{h}^I = \begin{pmatrix} \rho u_1 u_3 \\ \rho u_2 u_3 \\ \rho u_3^2 + P \\ (\rho E + P)u_3 \\ \rho_k u_3 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

où la pression statique P est déterminée par l'équation d'état des gaz parfaits (Eq. 2.15).

Les trois composantes du tenseur des flux visqueux $\mathbf{F}^V(\mathbf{w}, \nabla \mathbf{w})$ s'écrivent :

$$\mathbf{f}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{11} \\ -\tau_{12} \\ -\tau_{13} \\ -(u_1 \tau_{11} + u_2 \tau_{12} + u_3 \tau_{13}) + q_1 \\ J_{1,k} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{g}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{12} \\ -\tau_{22} \\ -\tau_{23} \\ -(u_1 \tau_{12} + u_2 \tau_{22} + u_3 \tau_{23}) + q_2 \\ J_{2,k} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

$$\mathbf{h}^V = \begin{pmatrix} -\tau_{13} \\ -\tau_{23} \\ -\tau_{33} \\ -(u_1 \tau_{13} + u_2 \tau_{23} + u_3 \tau_{33}) + q_3 \\ J_{3,k} \end{pmatrix}$$

où τ est le tenseur des contraintes visqueuses, μ est la viscosité dynamique (cf. section 2.6), $J_{i,k}$ est le flux diffusif de l'espèce k dans la direction i (cf. section 2.4) et q_i est le flux diffusif de chaleur (cf. section 2.5). τ est défini par :

$$\tau_{ij} = 2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right) \quad (2.5)$$

$$\text{avec : } S_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_i} + \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) \quad (2.6)$$

où S_{ij} est le tenseur des déformations.

Note : Par la suite, en l'absence de précision, les indices i , j et l désignent l'une des trois directions de l'espace. Leur répétition implique une sommation sur ces trois directions (notation d'Einstein). Dans tout ce document, l'indice k représente uniquement la $k^{\text{ième}}$ espèce et ne suit pas la règle de sommation (sauf dans les cas mentionnés).

2.2 Variables thermodynamiques

Les enthalpies $\tilde{h}_{s,k}$ et entropies \tilde{s}_k sensibles de chaque espèce sont tabulées tous les 100 K de 0 à 5000 K et sont définies respectivement par les Eq. 2.7 et 2.8. L'état de référence est pris à la pression $P_0 = 1 \text{ bar}$ et à la température $T_0 = 0 \text{ K}$. Le symbole $\tilde{}$ correspond à la valeur tabulée d'indice n et l'exposant m représente une valeur molaire. $\tilde{h}_{s,k}^m$, \tilde{s}_k^m et la masse molaire W_k sont déterminées à partir de la table JANAF [151]. Enfin, l'énergie sensible de l'espèce k est donnée par l'Eq. 2.9 où $r_k = \mathcal{R}/W_k$, avec $\mathcal{R} = 8.3143 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$ la constante universelle des gaz parfaits.

$$\tilde{h}_{s,k}(T_n) = \int_{T_0=0K}^{T_n} C_{p,k} dT = \frac{\tilde{h}_{s,k}^m(T_n) - \tilde{h}_{s,k}^m(T_0)}{W_k}, \quad n = 1, 51 \quad (2.7)$$

$$\tilde{s}_k(T_n) = \frac{\tilde{s}_k^m(T_n) - \tilde{s}_k^m(T_0)}{W_k}, \quad n = 1, 51 \quad (2.8)$$

$$\tilde{e}_{s,k}(T_n) = \int_{T_0=0K}^{T_n} C_{v,k} dT = \tilde{h}_{s,k}(T_n) - r_k T_n \quad n = 1, 51 \quad (2.9)$$

Les capacités calorifiques à pression constante $C_{p,k}$ et à volume constant $C_{v,k}$ sont supposées constantes entre T_n et $T_{n+1} = T_n + 100 \text{ K}$. Elles sont respectivement déterminées par les Eq. 2.10 et 2.11. L'énergie sensible $e_{s,k}$ de l'espèce k est définie par une interpolation linéaire via la température (Eq. 2.12). L'énergie sensible e_s et l'enthalpie sensible h_s du mélange sont respectivement définies par les Eq. 2.13 et 2.14.

$$C_{p,k} = \frac{\partial h_{s,k}}{\partial T} \quad (2.10)$$

$$C_{v,k} = \frac{\partial e_{s,k}}{\partial T} \quad (2.11)$$

$$e_{s,k}(T) = \tilde{e}_{s,k}(T_n) + (T - T_n) \frac{\tilde{e}_{s,k}(T_{n+1}) - \tilde{e}_{s,k}(T_n)}{T_{n+1} - T_n} \quad (2.12)$$

$$\rho e_s = \sum_{k=1}^N \rho_k e_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k e_{s,k} \quad (2.13)$$

$$\rho h_s = \sum_{k=1}^N \rho_k h_{s,k} = \rho \sum_{k=1}^N Y_k h_{s,k} \quad (2.14)$$

2.3 Équation d'état des gaz parfaits

L'équation d'état d'un mélange de gaz parfaits s'écrit :

$$P = \rho \frac{\mathcal{R}}{W} T \quad (2.15)$$

$$\text{avec : } \frac{1}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \quad (2.16)$$

où W est la masse molaire du mélange. La constante du mélange r et les capacités calorifiques C_p et C_v dépendent des fractions massiques :

$$r = \frac{\mathcal{R}}{W} = \sum_{k=1}^N \frac{Y_k}{W_k} \mathcal{R} = \sum_{k=1}^N Y_k r_k \quad (2.17)$$

$$C_p = \sum_{k=1}^N Y_k C_{p,k} \quad (2.18)$$

$$C_v = \sum_{k=1}^N Y_k C_{v,k} \quad (2.19)$$

L'exposant polytropique du mélange est donné par $\gamma = C_p/C_v$. La constante du mélange, les capacités calorifiques et l'exposant polytropique dépendent de la composition locale du mélange définie par les fractions massiques $Y_k(\mathbf{x}, t)$. Ils sont donc dépendants de l'espace et du temps :

$$r = r(\mathbf{x}, t), \quad C_p = C_p(\mathbf{x}, t), \quad C_v = C_v(\mathbf{x}, t), \quad \text{et} \quad \gamma = \gamma(\mathbf{x}, t) \quad (2.20)$$

À partir de l'énergie sensible, on déduit la température en utilisant les Eq. 2.12 et 2.13. La vitesse du son du mélange c est alors définie par :

$$c^2 = \gamma r T \quad (2.21)$$

2.4 Diffusion moléculaire multi-espèces

Dans un écoulement multi-espèces, la conservation de la masse totale implique que l'Eq. 2.22 soit satisfaite. \mathbf{V}^k représente la vitesse de diffusion de l'espèce k ($k = 1, \dots, N$) et s'exprime en utilisant l'approximation d'Hirschfelder-Curtis (Eq. 2.23). L'Eq. 2.23 fait intervenir les gradients des fractions molaires X_k définies par $X_k = Y_k W / W_k$. Exprimée en terme de fractions massiques, l'Eq. 2.23 devient l'Eq. 2.24.

$$\sum_{k=1}^N Y_k V_i^k = 0 \quad (2.22)$$

$$X_k V_i^k = -D_k \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.23)$$

$$Y_k V_i^k = -D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.24)$$

Si on somme les k Eq. 2.24, la conservation de la masse totale exprimée par l'Eq. 2.22 n'est pas nécessairement respectée en raison de l'approximation de Hirschfelder-Curtis. On ajoute alors la contribution d'une vitesse de diffusion corrective \mathbf{V}^c pour assurer la conservation de la masse totale de gaz (Eq. 2.25) [122]. Le flux de diffusion des espèces $J_{i,k}$ qui prend en compte cette correction est défini par

l'Eq. 2.26.

$$V_i^c = \sum_{k=1}^N D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} \quad (2.25)$$

$$J_{i,k} = \rho Y_k (V_i^k + V_i^c) = -\rho \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) \quad (2.26)$$

où D_k est la diffusivité de l'espèce k dans le mélange définie en section 2.6.

2.5 Diffusion de la chaleur

Le flux de chaleur total q est la somme de deux termes : le flux de chaleur par conduction, que l'on modélise par une loi de Fourier, et le flux de chaleur dû à la diffusion des espèces (cf. section 2.4). Ces deux termes sont détaillés dans l'Eq. 2.28.

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N J_{i,k} h_{s,k} \quad (2.27)$$

$$q_i = \underbrace{-\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i}}_{\text{conduction}} + \underbrace{-\rho \sum_{k=1}^N \left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right) h_{s,k}}_{\text{diffusion des espèces}} \quad (2.28)$$

où λ est la conductivité thermique du mélange définie en section 2.6.

2.6 Coefficients de transport diffusif

La viscosité dynamique μ est supposée indépendante de la composition du mélange. Pour estimer de façon réaliste la viscosité dynamique en fonction de la température, une loi puissance est utilisée :

$$\mu = \mu_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^b \quad (2.29)$$

où μ_0 est la viscosité mesurée à la température T_0 généralement dans le mélange de gaz frais. L'exposant b est typiquement dans la plage 0.5-1.0. Pour un mélange propane-air à la stoechiométrie, la loi puissance pour la viscosité dynamique est donnée par la relation :

$$\mu = 7,1659 \cdot 10^{-5} \left(\frac{T}{2240} \right)^{0,6624} \quad (2.30)$$

La conductivité thermique du mélange est définie par l'Eq. 2.31 qui utilise un nombre de Prandtl Pr supposé constant. La diffusivité thermique est définie par l'Eq. 2.32.

$$\lambda = \frac{\mu C_p}{Pr} \quad (2.31)$$

$$D_{th} = \frac{\mu}{\rho Pr} \quad (2.32)$$

La diffusivité moléculaire D_k est exprimée à l'aide des coefficients binaires D_{jk} obtenus à l'aide de la théorie cinétique des gaz [60]. La diffusivité moléculaire D_k est définie par l'Eq. 2.33 [13].

$$D_k = \frac{1 - Y_k}{\sum_{j \neq k}^N X_j / D_{jk}} \quad (2.33)$$

Les coefficients binaires D_{jk} sont des fonctions complexes dépendant des intégrales de collision et des variables thermodynamiques. Dans un code DNS qui utilise une chimie complexe, l'utilisation de l'Eq. 2.33 pour définir la diffusivité moléculaire est nécessaire. À l'inverse, les codes SGE qui utilisent un schéma cinétique simplifié ne nécessitent pas une modélisation aussi précise. On adopte donc une approche simplifiée en faisant l'hypothèse que les nombres de Schmidt de chaque espèce Sc_k sont constants. La diffusivité moléculaire D_k est alors définie par :

$$D_k = \frac{\mu}{\rho Sc_k} \quad (2.34)$$

où Sc_k est le nombre de Schmidt de l'espèce k supposé constant.

Pr et Sc_k modélisent respectivement la diffusion laminaire thermique et moléculaire. Leurs valeurs sont obtenues à l'aide de la librairie fortran EGLIB [42] et des bibliothèques de CHEMKIN2 [132], en calculant leurs valeurs dans les gaz brûlés issus de la mise en équilibre d'un mélange inflammable. Un exemple est donné Tab. 2.1 pour un mélange à six espèces (C_3H_8 , O_2 , N_2 , CO , CO_2 , H_2O) ne comportant initialement que du propane et de l'air à une richesse de 1 et à 700 K .

	C_3H_8	O_2	N_2	CO	CO_2	H_2O
Sc_k	1,2583	0,7385	0,7072	0,7487	0,9489	0,5452
$Pr = 0,7$						

TAB. 2.1 - Nombres de Schmidt pour les différentes espèces et nombre de Prandtl du mélange.

2.7 Cinétique chimique

Pour un système chimique de N réactifs \mathcal{M}_{kj} et m réactions, les réactions s'expriment sous la forme définie par l'Eq. 2.35.

$$\sum_{k=1}^N \nu'_{kj} \mathcal{M}_{kj} \rightleftharpoons \sum_{k=1}^N \nu''_{kj} \mathcal{M}_{kj}, \quad j = 1, M \quad (2.35)$$

Le taux de réaction $\dot{\omega}_k$ de l'espèce k est défini par l'Eq. 2.36 comme la somme des taux de réaction $\dot{\omega}_{kj}$ de l'espèce k dans chaque réaction j , j variant de 1 à M .

$$\dot{\omega}_k = \sum_{j=1}^M \dot{\omega}_{kj} = W_k \sum_{j=1}^M \nu_{kj} \mathcal{Q}_j \quad (2.36)$$

Les coefficients stoechiométriques des réactifs ν'_{kj} et des produits ν''_{kj} permettent de calculer les coefficients globaux $\nu_{kj} = \nu''_{kj} - \nu'_{kj}$, et \mathcal{Q}_j correspond au taux d'avancement de la réaction j définie par l'Eq. 2.37.

$$\mathcal{Q}_j = K_{f,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu'_{kj}} - K_{r,j} \prod_{k=1}^N \left(\frac{\rho Y_k}{W_k} \right)^{\nu''_{kj}} \quad (2.37)$$

$K_{f,j}$ et $K_{r,j}$ sont les constantes des réactions directe et inverse. Dans AVBP, la constante de réaction directe est modélisée par une loi Arrhenius :

$$K_{f,j} = A_{f,j} T^\beta \exp\left(-\frac{E_{a,j}}{\mathcal{R}T}\right) \quad (2.38)$$

$A_{f,j}$ est le facteur pré-exponentiel (unité : cgs) et $E_{a,j}$ est l'énergie d'activation de la réaction j . Le terme T^β permet de prendre en compte les effets de la température.

La constante de réaction inverse $K_{r,j}$ est imposée par l'hypothèse d'équilibre thermodynamique :

$$K_{r,j} = \frac{K_{f,j}}{K_{eq}} \quad (2.39)$$

où K_{eq} [78] est la constante d'équilibre :

$$K_{eq} = \left(\frac{P_0}{\mathcal{R}T} \right)^{\sum_{k=1}^N \nu_{kj}} \exp\left(\frac{\Delta S_j^0}{\mathcal{R}} - \frac{\Delta H_j^0}{\mathcal{R}T} \right) \quad (2.40)$$

ΔH_j^0 est la variation d'enthalpie (sensible + chimique) définie par l'Eq. 2.41 et ΔS_j^0 la variation d'entropie pour la réaction j définie par l'Eq. 2.42. $\Delta h_{f,k}^0$ est l'enthalpie de formation de l'espèce k à la température et pression de référence respective $T_0 = 0 \text{ K}$ et $P_0 = 1 \text{ bar}$.

$$\Delta H_j^0 = h_j(T) - h_j(0) = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} (h_{s,k}(T) + \Delta h_{f,k}^0) \quad (2.41)$$

$$\Delta S_j^0 = \sum_{k=1}^N \nu_{kj} s_k(T) \quad (2.42)$$

Le dégagement de chaleur $\dot{\omega}_T$ est alors donné par :

$$\dot{\omega}_T = - \sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k \Delta h_{f,k}^0 \quad (2.43)$$

Le terme source \mathbf{s}_c de l'Eq. 2.1 est alors défini par :

$$\mathbf{s}_c = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \dot{\omega}_T \\ \dot{\omega}_k \end{pmatrix} \quad (2.44)$$

avec $\dot{\omega}_T$ (Eq. 2.43) le taux de dégagement de chaleur et $\dot{\omega}_k$ (Eq. 2.36) le taux de réaction de l'espèce k .

Equations pour la SGE réactive

Plusieurs méthodologies de calcul sont communément utilisées en calcul moteur. Les modèles 0D/1D comme des modèles multi-zones [9] sont couramment utilisés dans la conception des moteurs, la prédiction et le contrôle de polluants. Dans cette thèse nous nous sommes intéressés à une modélisation 3D du moteur. Ainsi de ce point de vue, la turbulence doit être modélisée et trois niveaux de modélisation qui bénéficient continuellement de la baisse du coût de calcul sont à citer. Le premier, principale approche depuis 15 ans et qui continue d'être la méthode la plus utilisée à l'heure actuelle est l'approche RANS. Celle-ci consiste à résoudre les quantités moyennées en phase pour converger vers un cycle moyen unique. Ce type de modélisation requière des modèles pour tenir compte des phénomènes physiques clés comme des modèles de turbulence [147]. Cette approche présente l'avantage d'être la moins coûteuse des trois niveaux de modélisation, cependant elle ne permet pas d'obtenir des informations sur les cycles individuels moteur.

La méthode DNS (pour Direct Numerical Simulation en anglais) se situe à l'opposé du RANS en terme de temps de calcul et de modélisation. Elle permet de résoudre de manière instantanée les équations de Navier-Stokes non filtrées sur des maillages suffisamment fins pour résoudre toutes les échelles de l'écoulement. Cependant, ce type de modélisation est utilisé seulement en géométrie simple et est encore hors de portée pour être appliqué sur un écoulement de moteur à allumage commandé. Néanmoins, ce niveau de modélisation permet d'isoler et d'appréhender des mécanismes physiques qui prennent place dans les moteurs comme l'interaction flamme/paroi [120] ou l'auto-allumage [28, 55].

La SGE est un niveau intermédiaire entre le RANS et la DNS. Elle consiste à appliquer une opération de filtrage spatial aux équations de Navier-Stokes. Un nouveau système d'équations de conservation est alors obtenu et des termes non résolus dus à l'opération de filtrage nécessitent des modèles de fermetures. Dans le champ d'application des moteurs à combustion interne, cette approche devient de plus en plus attractive puisque par définition elle permet de résoudre de manière instantanée les grandes échelles résolues sur le maillage, et offre ainsi la possibilité de capturer les VCC associées à ces échelles de l'écoulement.

Dans ce chapitre, les équations de conservation filtrées de la SGE (section 3.1) ainsi que les modèles de fermeture correspondants (section 3.2) sont tout d'abord présentés. La section 3.3 présente le modèle

de combustion turbulente choisi dans cette étude : le modèle de flamme épaisse.

3.1 Équations SGE

3.1.1 Filtrage SGE des équations de Navier-Stokes

La procédure de filtrage consiste à définir la quantité filtrée \bar{f} comme le produit de convolution de la quantité non filtrée f avec un filtre spatial G_Δ de taille caractéristique Δ :

$$\bar{f}(x) = \int f(x') G_\Delta(x' - x) dx' \quad (3.1)$$

Le filtre G_Δ est classiquement de type boîte ou gaussien [134]. La quantité filtrée \bar{f} est calculée en résolvant numériquement son équation de transport. La quantité de sous-maille non résolue est $f' = f - \bar{f}$. Pour les écoulements à masse volumique variable, il est pratique d'utiliser une quantité filtrée au sens de Favre, c'est à dire pondérée par la masse volumique :

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

On obtient les équations de conservation de type SGE en filtrant les équations de Navier-Stokes instantanées (Eq. 2.1) :

$$\frac{\partial \bar{\mathbf{w}}}{\partial t} + \nabla \cdot \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{s}}_c \quad (3.3)$$

où $\bar{\mathbf{s}}_c$ est le terme source filtré et $\bar{\mathbf{F}}$ est le tenseur des flux filtrés composé de trois contributions :

$$\bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{F}}^I + \bar{\mathbf{F}}^V + \bar{\mathbf{F}}^t \quad (3.4)$$

avec

$$\text{tenseur des flux convectifs résolus : } \bar{\mathbf{F}}^I = \left(\bar{\mathbf{f}}^I, \bar{\mathbf{g}}^I, \bar{\mathbf{h}}^I \right)^T \quad (3.5)$$

$$\text{tenseur des flux diffusifs résolus : } \bar{\mathbf{F}}^V = \left(\bar{\mathbf{f}}^V, \bar{\mathbf{g}}^V, \bar{\mathbf{h}}^V \right)^T \quad (3.6)$$

$$\text{tenseur des flux de sous-maille : } \bar{\mathbf{F}}^t = \left(\bar{\mathbf{f}}^t, \bar{\mathbf{g}}^t, \bar{\mathbf{h}}^t \right)^T \quad (3.7)$$

Dans le code AVBP, l'échelle de coupure est fixée par la taille de la maille (filtrage implicite). De manière classique, on suppose qu'il y a commutation entre l'opérateur de filtrage et les opérateurs de dérivée partielle. Pour des dérivées spatiales, cet échange n'est plus valide si la taille du maillage varie spatialement. Cependant l'erreur de commutation commise est en générale négligeable [47]. Dans une configuration de maillage mobile où la taille des cellules varie également avec le temps, une source d'erreur vient s'ajouter avec les dérivées temporelles. Cependant, Moureau *et al.* [108] ont montré que les erreurs de commutation temporelles sont négligeables puisque la dissipation de l'énergie cinétique liée à ces erreurs est très petite devant la dissipation liée au modèle de sous-maille (voir section 3.2).

3.1.2 Flux convectifs résolus

Les trois composantes du tenseur des flux convectifs résolus $\bar{\mathbf{F}}^I$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho u_1^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho u_1 u_2} \\ \overline{\rho u_1 u_3} \\ \overline{\rho \tilde{E} u_1} + \bar{P} u_1 \\ \overline{\rho_k u_1} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{g}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho u_1 u_2} \\ \overline{\rho u_2^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho u_2 u_3} \\ \overline{\rho \tilde{E} u_2} + \bar{P} u_2 \\ \overline{\rho_k u_2} \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{h}}^I = \begin{pmatrix} \overline{\rho u_1 u_3} \\ \overline{\rho u_2 u_3} \\ \overline{\rho u_3^2} + \bar{P} \\ \overline{\rho \tilde{E} u_3} + \bar{P} u_3 \\ \overline{\rho_k u_3} \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

3.1.3 Flux diffusifs résolus

Les trois composantes du tenseur des flux diffusifs résolus $\bar{\mathbf{F}}^V$ sont définies par :

$$\bar{\mathbf{f}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{11}} \\ -\overline{\tau_{12}} \\ -\overline{\tau_{13}} \\ -(\overline{u_1 \tau_{11}} + \overline{u_2 \tau_{12}} + \overline{u_3 \tau_{13}}) + \overline{q_1} \\ \overline{J_{1,k}} \end{pmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{g}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{12}} \\ -\overline{\tau_{22}} \\ -\overline{\tau_{23}} \\ -(\overline{u_1 \tau_{12}} + \overline{u_2 \tau_{22}} + \overline{u_3 \tau_{23}}) + \overline{q_2} \\ \overline{J_{2,k}} \end{pmatrix} \quad (3.9)$$

$$\bar{\mathbf{h}}^V = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{13}} \\ -\overline{\tau_{23}} \\ -\overline{\tau_{33}} \\ -(\overline{u_1 \tau_{13}} + \overline{u_2 \tau_{23}} + \overline{u_3 \tau_{33}}) + \overline{q_3} \\ \overline{J_{3,k}} \end{pmatrix}$$

En considérant que les propriétés thermodynamiques du gaz varient spatialement mais restent constantes à l'intérieur du filtre, les termes de diffusion en SGE peuvent s'approximer par :

Tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}$

$$\overline{\tau_{ij}} = \overline{2\mu \left(S_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} S_{ll} \right)} \quad (3.10)$$

$$\text{approximation : } \overline{\tau_{ij}} \approx \overline{2\bar{\mu} \left(\tilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{S}_{ll} \right)} \quad (3.11)$$

$$\text{avec : } \tilde{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} + \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} \right) \quad (3.12)$$

$$\bar{\mu} \approx \mu(\tilde{T}) \quad (3.13)$$

Tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}$

$$\overline{J_{i,k}} = -\rho \overline{\left(D_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial X_k}{\partial x_i} - Y_k V_i^c \right)} \quad (3.14)$$

$$\text{approximation : } \overline{J_{i,k}} \approx -\bar{\rho} \left(\bar{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} - \tilde{Y}_k \tilde{V}_i^c \right) \quad (3.15)$$

$$\text{avec : } \tilde{V}_i^c = \sum_{k=1}^N \bar{D}_k \frac{W_k}{W} \frac{\partial \tilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (3.16)$$

$$\bar{D}_k \approx \frac{\bar{\mu}}{\bar{\rho} S c_k} \quad (3.17)$$

Fux de chaleur $\overline{q_i}$

$$\overline{q_i} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} h_{s,k}} \quad (3.18)$$

$$\text{approximation : } \overline{q_i} \approx -\bar{\lambda} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k} \tilde{h}_{s,k}} \quad (3.19)$$

$$\text{avec : } \bar{\lambda} \approx \frac{\bar{\mu} \bar{C}_p(\tilde{T})}{Pr} \quad (3.20)$$

Les équations de conservation filtrées font apparaître des termes de sous-maille dont la modélisation est présentée dans la section 3.1.4.

3.1.4 Termes de sous-maille

Les trois composantes du tenseur de sous-maille $\overline{\mathbf{F}}^t$ sont définies par :

$$\overline{\mathbf{f}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{11}}^t \\ -\overline{\tau_{12}}^t \\ -\overline{\tau_{13}}^t \\ \overline{q_1}^t \\ \overline{J_{1,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \overline{\mathbf{g}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{12}}^t \\ -\overline{\tau_{22}}^t \\ -\overline{\tau_{23}}^t \\ \overline{q_2}^t \\ \overline{J_{2,k}}^t \end{pmatrix}, \quad \overline{\mathbf{h}}^t = \begin{pmatrix} -\overline{\tau_{13}}^t \\ -\overline{\tau_{23}}^t \\ -\overline{\tau_{33}}^t \\ \overline{q_3}^t \\ \overline{J_{3,k}}^t \end{pmatrix} \quad (3.21)$$

La turbulence correspond à un mécanisme de mélange et elle peut être modélisée par de la diffusion. Sous cette hypothèse, les différents termes s'écrivent :

Tenseur des contraintes $\overline{\tau_{ij}}^t$

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (3.22)$$

En considérant l'hypothèse de Boussinesq, les termes de sous-maille de l'équation de quantité de mouvement s'écrivent :

$$\text{modèle : } \quad \overline{\tau_{ij}}^t = 2\bar{\rho}\nu_t \left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S}_{ll} \right) \quad (3.23)$$

La viscosité turbulente ν_t est calculée par un modèle de sous-maille décrit en section 3.2.

Tenseur de diffusion des espèces $\overline{J_{i,k}}^t$

$$\overline{J_{i,k}}^t = \bar{\rho} \left(\widetilde{u_i Y_k} - \widetilde{u_i} \widetilde{Y_k} \right) \quad (3.24)$$

En considérant l'approximation de Hirschfelder et Curtis, on obtient :

$$\text{modèle : } \quad \overline{J_{i,k}}^t = -\bar{\rho} \left(D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} - \widetilde{Y_k} \widetilde{V_i}^{c,t} \right) \quad (3.25)$$

$$\text{avec : } \quad \widetilde{V_i}^{c,t} = \sum_{k=1}^N D_k^t \frac{W_k}{W} \frac{\partial \widetilde{X}_k}{\partial x_i} \quad (3.26)$$

$$D_k^t = \frac{\nu_t}{Sc_k^t} \quad (3.27)$$

Le nombre de Schmidt turbulent est fixé à $Sc_k^t = 0.6$ pour toutes les espèces.

Flux de chaleur $\overline{q_i}^t$

$$\overline{q_i}^t = \bar{\rho} \left(\widetilde{u_i E} - \widetilde{u_i} \widetilde{E} \right) \quad (3.28)$$

En modélisant le flux de chaleur par la loi de Fourier, le terme de sous-maille devient :

$$\text{modèle : } \quad \overline{q_i}^t = -\lambda_t \frac{\partial \widetilde{T}}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^N \overline{J_{i,k}}^t \widetilde{h_{s,k}} \quad (3.29)$$

$$\text{avec : } \quad \lambda_t = \frac{\mu_t \overline{C_p}}{Pr_t} \quad (3.30)$$

Dans les simulations présentées par la suite, le nombre de Prandtl turbulent a été fixé à $Pr_t = 0.6$.

3.2 Modèles de sous-maille

Pour l'équation de quantité de mouvement, l'effet des échelles de sous-maille sur les échelles résolues est classiquement pris en compte au travers d'un modèle de sous-maille, dit modèle SGS (pour *Subgrid-Scale* en anglais), utilisant une viscosité turbulente ν_t . Une telle approche suppose que les effets de sous-maille soient uniquement d'ordre dissipatif.

En introduisant la notion de viscosité turbulente, on définit la forme générale suivante pour les modèles SGS :

$$\overline{\tau_{ij}}^t = -\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \widetilde{u_i} \widetilde{u_j}) \quad (3.31)$$

$$\text{modèle : } \overline{\tau_{ij}}^t = 2 \bar{\rho} \nu_t \left(\widetilde{S}_{ij} - \frac{1}{3} \widetilde{S}_{ll}^t \delta_{ij} \right) \quad (3.32)$$

où $\overline{\tau_{ij}}^t$ est le tenseur des contraintes à modéliser, ν_t est la viscosité turbulente de sous-maille, $\widetilde{u_i}$ est le vecteur vitesse filtré et \widetilde{S}_{ij} est le tenseur résolu des déformations. Les différents modèles se distinguent par la définition et le calcul de la viscosité turbulente de sous-maille ν_t .

Modèle de Smagorinsky

Le modèle de Smagorinsky [143] standard est très répandu du fait de sa simplicité et a fait l'objet de très nombreux tests dans la littérature sur divers types d'écoulement. Dans le cas d'une turbulence homogène isotrope, il a été montré qu'il fournit le bon niveau de dissipation de l'énergie cinétique. Toutefois, ce modèle est connu pour être trop dissipatif, particulièrement près des parois, et son utilisation pour des régimes de transition vers la turbulence n'est pas recommandée [133]. Pour ce modèle, la viscosité turbulente s'écrit :

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \widetilde{S}_{ij} \widetilde{S}_{ij}} \quad (3.33)$$

$$\text{avec : } C_S = (0.1 - 0.18) \quad \text{suivant la configuration} \quad (3.34)$$

La valeur standard de $C_S = 0.18$ a été retenue pour les calculs présentés par la suite.

D'autres modèles plus complexes existent dans AVBP. On peut citer notamment le modèle de Smagorinsky filtré ainsi que le modèle WALE. Le modèle de Smagorinsky filtré a été développé pour améliorer la prédiction de la transition vers la turbulence [39]. Le modèle WALE quant à lui a été développé par Nicoud et Ducros [111] afin de pallier au défaut du modèle de Smagorinsky standard concernant la dissipation en proche paroi.

Dans le cadre des calculs du banc moteur présentés dans les chapitres suivants, l'utilisation est limitée au modèle de Smagorinsky standard. Le modèle WALE n'a pu être utilisé en raison de son incompatibilité avec la formulation de loi de paroi glissante (voir section 3.4). En effet, en loi de paroi la vitesse sur le mur n'a pas de sens physique et sa valeur est essentiellement dictée par la viscosité turbulente de la cellule au mur comme le montre l'Eq. 3.35. Avec un modèle de WALE qui prédit une viscosité turbulente proche de zéro à la paroi, le gradient de vitesse devient alors très raide ce qui cause des oscillations numériques [64].

$$\begin{aligned} \left. \frac{du}{dy} \right|_w &= \frac{\tau_w(u_b, y_b)}{\mu_w + \mu_{t,w}} \\ u_a = u_b &- \frac{\Delta y \tau_w}{\mu_w + \mu_{t,w}} \end{aligned} \quad (3.35)$$

où τ_w est le frottement à la paroi obtenu par la loi de paroi (section 3.4), Δy est la distance du premier point à la paroi, \tilde{u}_a et \tilde{u}_b sont respectivement les vitesses sur la paroi et sur le premier point dans le domaine, et μ_w et $\mu_{t,w}$ sont les viscosités dynamiques laminaire et turbulente dans l'élément adjacent à la paroi.

3.3 Modèle de combustion turbulente

Les travaux portant sur la modélisation de l'interaction entre la turbulence et la combustion ont débuté il y a plus de trente ans avec les recherches de Spalding [148] pour la simulation RANS. Les études consacrées à la combustion turbulente pour la SGE n'ont commencé que dans les années 90 et de nombreuses questions restent encore ouvertes.

La difficulté de la simulation en combustion turbulente est liée en particulier au rapport d'échelle entre l'épaisseur de la zone réactive et la dimension des mailles de la grille de calcul. Pour les SGE réactives réalisées en moteurs à combustion interne, la taille des mailles est de l'ordre du dixième de millimètre alors que l'épaisseur du front de flamme varie de 0.06 mm à 0.01 mm pour la combustion propane-air dont la température et la pression des gaz frais varient de [$P = 5.5 \text{ bar}$, $T = 720 \text{ K}$] à [$P = 20 \text{ bar}$, $T = 970 \text{ K}$].

Dans la modélisation de la combustion, on fait généralement une distinction entre les modèles pour les régimes de prémélange, les régimes non prémélangés et partiellement prémélangés. On trouve une description de l'ensemble de ces modèles RANS et SGE dans la revue de Veynante et Vervisch [163], et dans le livre de Poinot et Veynante [122]. La revue de Bilger et al. [12] fait également état des différentes théories et modèles pour les trois régimes de combustion turbulente, et Pitsch [119] spécifie sa revue en s'attachant aux modèles utilisés en SGE.

Pour son fonctionnement en injection indirecte, le banc moteur F7P présente un régime de combustion purement prémélangé. Pour ce type de régime, l'étude de Thobois [155] a montré les capacités du modèle de flamme épaissie à traiter le développement de la flamme dans une configuration de moteur à piston et à en capturer les VCC. Dans la présente étude, ce modèle sera alors repris pour simuler différents points de fonctionnement d'un banc mono-cylindre à allumage commandé.

Les sections suivantes décrivent les différentes déclinaisons du modèle de flamme épaissie : modèle de flamme épaissie en DNS (TF, section 3.3.1), modèle de flamme épaissie en SGE (TFLES, section 3.3.2) et le modèle de flamme épaissie dynamique (DTFLES, section 3.3.3) permettant son application uniquement dans le front de flamme.

3.3.1 Flamme laminaire épaissie (TF)

Le concept du modèle TF (pour *Thickened Flame* en anglais) est d'augmenter l'épaisseur de la flamme de manière à pouvoir la résoudre sur les maillages SGE tout en s'assurant que la vitesse de flamme épaissie reste égale à la vitesse de flamme laminaire. Butler et O'Rourke [22] sont les premiers à avoir proposé d'épaissir artificiellement une flamme laminaire de prémélange pour la propager sur un maillage

grossier. Une analyse dimensionnelle classique [166] montre que la vitesse de flamme laminaire S_L^0 et l'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 sont contrôlées par la diffusivité thermique D_{th} et la constante pré-exponentielle A (cf. section 2.7).

$$S_L^0 \propto \sqrt{D_{th}A} \quad (3.36)$$

$$\delta_L^0 \propto \frac{D_{th}}{S_L^0} = \sqrt{\frac{D_{th}}{A}} \quad (3.37)$$

En se basant sur les équations Eq. 3.36 et 3.37, il est possible d'épaissir une flamme de prémélange sans altérer sa vitesse de propagation. En effet en multipliant les coefficients de diffusion par un facteur F (facteur d'épaississement) et en divisant le taux de réaction de la flamme par ce même facteur, on obtient une flamme d'épaisseur $\delta_L^1 = F\delta_L^0$ dont la vitesse de consommation est préservée par rapport à la DNS : $S_L^1 = \frac{\sqrt{F}}{\sqrt{F}}S_L^0$. Le modèle de flamme épaissie conduit aux modifications suivantes :

épaississement

$$\delta_L^0 \longrightarrow F\delta_L^0 \quad (3.38)$$

$$S_L^0 \longrightarrow S_L^0 \quad (3.39)$$

$$D_{th} \longrightarrow FD_{th} \quad (3.40)$$

$$D_k \longrightarrow FD_k \quad (3.41)$$

$$\dot{\omega}_T \longrightarrow \dot{\omega}_T/F \quad (3.42)$$

$$\dot{\omega}_k \longrightarrow \dot{\omega}_k/F \quad (3.43)$$

où $\dot{\omega}_T$ et $\dot{\omega}_k$ sont prédits par le schéma cinétique qui utilise une loi d'Arrhénius (cf. Eq. 2.37).

Toutefois, dans le cas d'écoulements turbulents, l'épaississement a pour effet de modifier le rapport entre l'échelle de longueur de la turbulence et l'épaisseur de la flamme. Pour les études en SGE, le modèle doit donc être complété afin de corriger cet effet. Le modèle complet TF en SGE est décrit dans la section 3.3.2.

3.3.2 Modèle de flamme épaissie pour la combustion turbulente (TFLES)

La modification artificielle de l'épaisseur d'une flamme conduit à la modification de son nombre de Damköhler, $Da = \tau_t/\tau_c = (l_t S_L^0)/(u' \delta_L^0)$, d'un facteur $1/F$. Il y a donc tout un ensemble de tourbillons qui n'a plus d'effet sur la flamme SGE alors que la flamme DNS y était sensible (les échelles comprises entre δ_L^0 et $F\delta_L^0$). Le but du modèle TFLES est de corriger cette perte de sensibilité à la turbulence de la flamme.

Ce modèle est valide pour un régime dit de flammelette (du diagramme de combustion de Peters [116]). Dans un tel régime, la turbulence modifie la structure de la flamme en augmentant son plissement et son étirement local. Sous ces hypothèses la vitesse de flamme turbulente S_T est liée à la vitesse laminaire S_L^0 par la relation [20] :

$$\frac{S_T}{S_L^0} = I_0 \int_{-\infty}^{+\infty} \Sigma d\eta = I_0 \frac{A_T}{A_L} \quad (3.44)$$

où I_0 est le facteur d'étirement (Eq. 3.45), Σ la densité de surface de flamme, η la coordonnée normale au plan moyen de flamme, et le rapport des surfaces de flamme turbulente et laminaire A_T/A_L représente le plissement de la flamme (Fig. 3.1). Bray et Cant [20] définissent le facteur d'étirement par la relation suivante :

$$I_0 = \frac{\bar{S}_c}{S_L^0} \quad \text{avec} \quad S_c = \frac{1}{\rho^{GF}} \int \dot{\omega}_R d\xi \quad (3.45)$$

où \bar{S}_c est la moyenne temporelle de la vitesse locale de consommation S_c , ρ^{GF} est la densité des gaz frais, $\dot{\omega}_R$ le taux de consommation local de la flamme, et ξ est la direction normale au front de flamme.

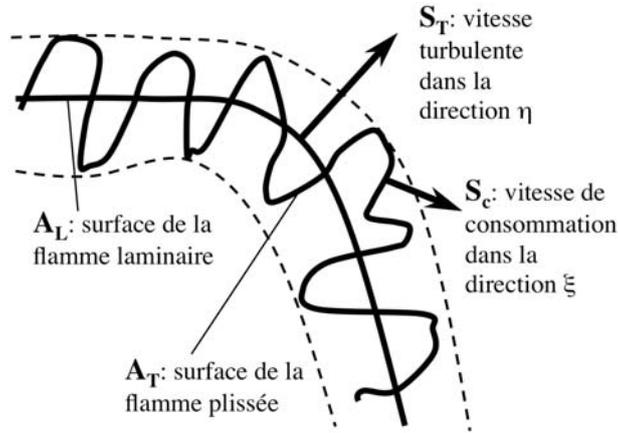


FIG. 3.1 - Schéma d'une flamme plissée turbulente dans le régime de flammelette.

L'épaississement d'une flamme turbulente a pour effet de modifier son plissement ainsi que son étirement local (cf. Fig. 3.2). Colin *et al.* [30] proposent un modèle introduisant une fonction d'efficacité E construite à partir de calculs DNS d'interaction flamme/vortex pour corriger la perte des effets de plissement induite par l'épaississement. Ce modèle se base sur l'hypothèse que l'étirement lié à la turbulence augmente la surface de flamme, mais son effet sur la vitesse de consommation locale est négligeable. La vitesse de consommation locale est donc prise égale à la vitesse d'une flamme laminaire.

Fonction d'efficacité E

On trouve une description complète de la fonction d'efficacité E dans l'article de Colin *et al.* [30]. Leur étude repose sur l'analyse de l'équation de transport de la densité de surface de flamme. En supposant un équilibre au niveau du front de flamme entre les termes de production et de destruction de la densité de surface de flamme [30, 27], le plissement $\Xi = A_T/A_L$ peut être lié à la vitesse turbulente locale de sous-maille par la relation :

$$\Xi(\delta_L^0) \simeq 1 + \alpha\Gamma \left(\frac{\Delta_e}{\delta_L^0}, \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \right) \frac{u'_{\Delta_e}}{S_L^0} \quad (3.46)$$

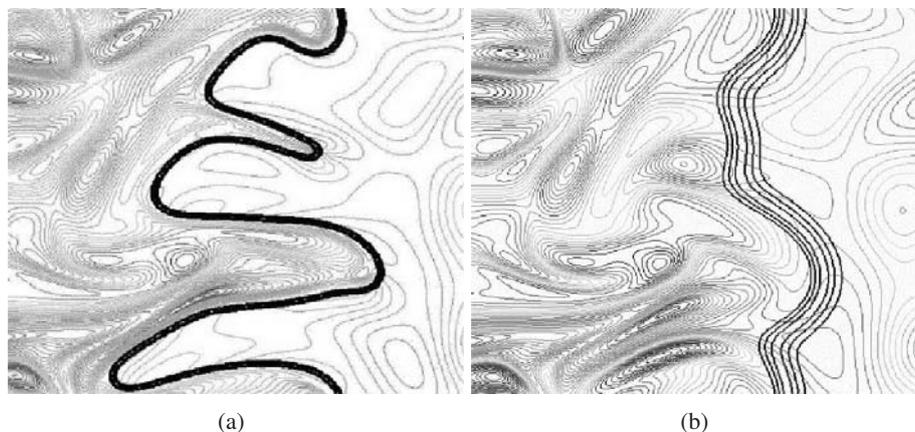


FIG. 3.2 - DNS d'interaction flamme/turbulence [4, 122]. Flamme non épaissie (a.), flamme épaissie d'un facteur $F = 5$ (b.)

où α est une constante du modèle (son calcul est présenté plus bas) et la fonction Γ permet de prendre en compte le taux d'étirement lié à toutes les échelles influencées par l'épaississement, dépendant de la fluctuation de vitesse de sous-maille u'_{Δ_e} , de la taille du filtre Δ_e et des caractéristiques de la flamme (Fig. 3.3).

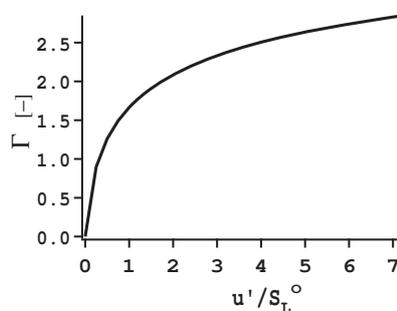


FIG. 3.3 - Evolution de Γ en fonction du rapport de vitesse u'_{Δ_e}/S_L^0 pour $\Delta_e/\delta_L^0 = 20$.

Finalement la vitesse locale S_{SGE} de la flamme SGE corrigée est donnée par la relation liant la vitesse de flamme laminaire S_L^0 et la fonction d'efficacité E :

$$\frac{S_{SGE}}{S_L^0} = \frac{A_{SGE}}{A_L} = \frac{A_{SGE}}{A_T} \frac{A_T}{A_L} = \frac{\Xi(\delta_L^0)}{\Xi(\delta_L^1)} = E \quad (3.47)$$

où $\delta_L^1 = F\delta_L^0$ l'épaisseur de la flamme épaissie.

Estimation de la constante α

La constante α est estimée de façon à retrouver la théorie de Damköhler : $S_T/S_L^0 \approx 1 + \beta u'/S_L^0$ (valable pour les faibles valeurs de u' [122]). Sous l'hypothèse des flammes minces et que Δ_e tend vers l'échelle intégrale l_t , le plissement Ξ tend vers un plissement maximum Ξ_{max} défini par l'Eq. 3.48 [30]. L'Eq. 3.49 qui définit α se déduit de l'Eq. 3.48.

$$\Xi_{max} = 1 + \beta u'/S_L^0 = 1 + \alpha \Gamma_{l_t} u'/S_L^0 \quad (3.48)$$

$$\alpha = \beta \frac{2 \ln(2)}{3c_{ms} (Re_t^{1/2} - 1)} \quad (3.49)$$

$$\text{avec : } Re_t = \frac{u' l_t}{\nu} \quad \text{et} \quad c_{ms} = 0.28 \quad (3.50)$$

La constante β est supposée proche de l'unité par Colin *et al.* [30]. Pour tous les calculs de cette thèse, on a utilisé ce modèle associé à un amortissement de la fonction d'efficacité en proche paroi (appelé ICHEM=4 dans AVBP) avec un paramètre $\beta = 2$.

3.3.3 Modèle de flamme épaissie dynamique (DTFLES)

Principe de fonctionnement

Le modèle de flamme épaissie décrit dans la section 3.3.2 augmente les coefficients de diffusion dans tout le domaine de calcul alors que son action est uniquement requise dans le front de flamme. Pour ne pas perturber les processus de diffusion dans les gaz frais et gaz brûlés, et ainsi modifier les transferts thermiques pariétaux, le modèle de flamme épaissie dynamique [89] (DTF pour *Dynamically Thickened Flame* en anglais) a été utilisé de manière à ce que l'épaississement soit égale à F_{max} dans la zone réactive et $F = 1$ ailleurs (Fig. 3.4 et Fig. 3.5).

L'épaississement dynamique est défini par $F = 1 + (F_{max} - 1) S$. Le senseur S défini par l'Eq. 3.51 évalue si la zone est réactive ($S = 1$) ou non ($S = 0$) à l'aide de la fonction de présence Ω utilisant des paramètres du schéma cinétique : E_a , ν'_F et ν'_O .

$$S = \tanh\left(\beta' \frac{\Omega}{\Omega_0}\right) \quad \text{avec : } \beta' = 500 \quad (3.51)$$

$$\Omega = Y_F^{\nu'_F} Y_O^{\nu'_O} \exp\left(-\Gamma_T \frac{E_a}{\mathcal{R}T}\right) \quad (3.52)$$

Le paramètre Γ_T est utilisé pour enclencher la fonction d'épaississement avant la réaction et vaut typiquement pour les calculs moteur : $\Gamma_T = 0.8$. Ω_0 est déterminé en calculant le maximum de Ω dans une flamme laminaire de prémélange 1D non épaissie. Une illustration de l'influence des paramètres Γ_T et β' est présentée sur la Fig. 3.6.

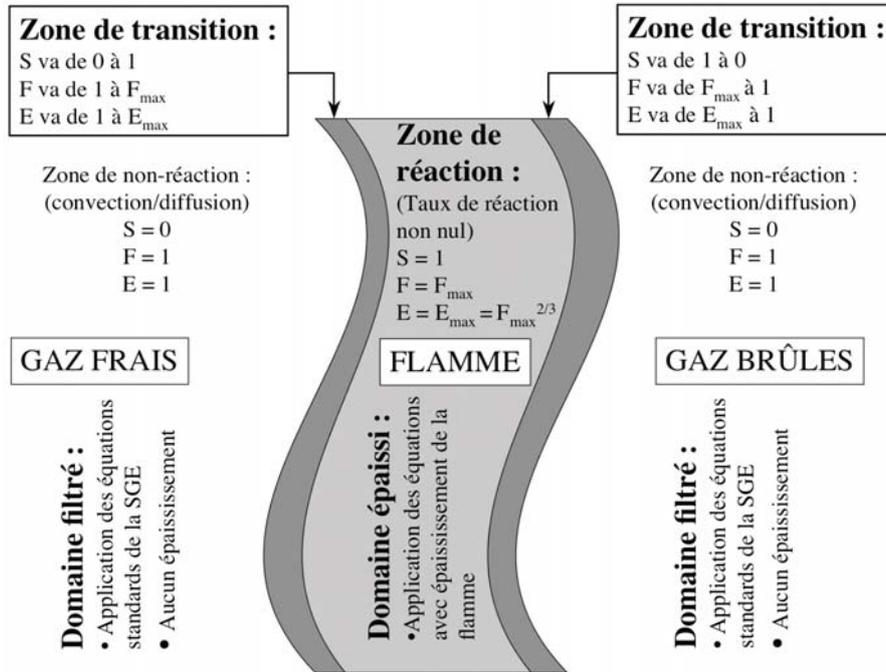
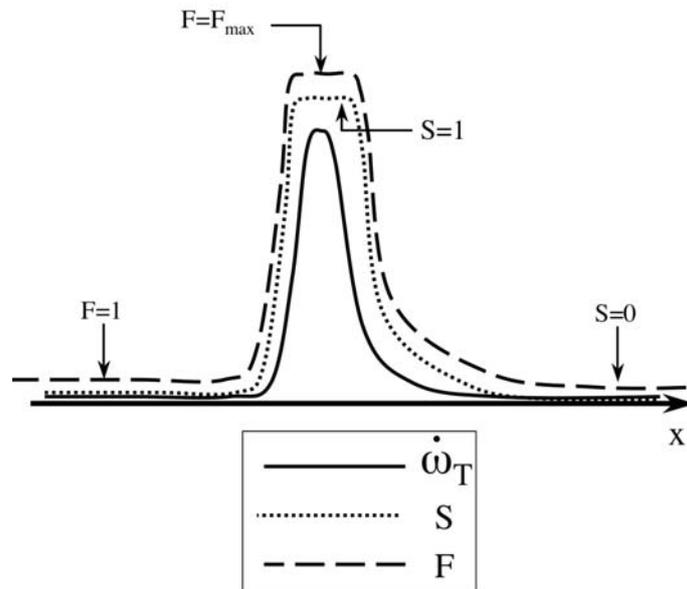
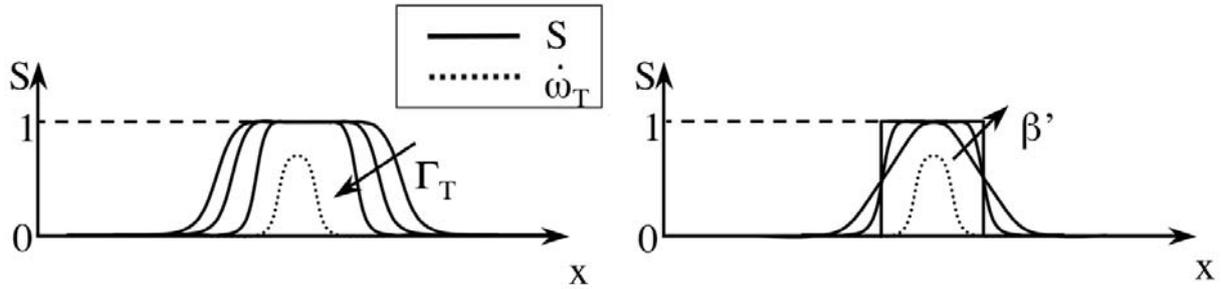


FIG. 3.4 - Principe de fonctionnement de l'épaississement dynamique DTF.

FIG. 3.5 - Positionnement du capteur S et de l'épaississement F par rapport à la flamme $\dot{\omega}_T$.

FIG. 3.6 - Impacts des paramètres Γ_T et β' sur le senseur S .

Facteur d'épaissement dépendant de la résolution locale

Dans les calculs SGE où la taille des mailles varie spatialement, il est indispensable d'adapter le facteur d'épaissement au maillage local. Pour ce faire, on évalue F_{max} selon l'expression suivante :

$$F_{max} = n \frac{\Delta x}{\delta_L^0} \quad (3.53)$$

où Δx est la taille locale de la maille et n est le nombre de cellules contenues dans l'épaisseur du front de flamme épaissi. Les valeurs $n = 4 - 5$ sont des valeurs utilisées dans la suite du manuscrit, suffisantes pour résoudre correctement le front de flamme en évitant les erreurs numériques dues à des gradients mal résolus.

3.4 Modélisation des frontières du domaine de calcul

Cette section présente le traitement numérique des conditions limites. Dans une première partie, les conditions aux limites caractéristiques qui utilisent le formalisme NSCBC sont présentées. Dans la seconde partie, l'approximation faite pour la modélisation de la paroi est décrite.

3.4.1 Les conditions caractéristiques

Les conditions limites sont un point crucial, et c'est particulièrement le cas pour le code AVBP dont le but est de résoudre des écoulements compressibles réactifs dans des milieux confinés tels que des chambres de combustion. Dans ces dernières, les ondes acoustiques sont générées par de forts cisaillements ou une fluctuation du dégagement de chaleur. Elles doivent alors être évacuées aux entrées ou sorties afin d'éviter une mise en résonance du domaine. Une correction est alors apportée au résidu. Une première approche consiste à modifier le résidu en agissant directement sur les variables conservatives. Cette méthode n'est alors pas adaptée puisqu'elle réfléchit complètement les ondes acoustiques sortantes et génère ainsi du bruit. Cette difficulté est appréhendée grâce à l'approche caractéristique où le résidu est modifié par un traitement de la condition limite en trois étapes : les variables conservatives prédites par le

schéma sont traduites en variables caractéristiques ; les ondes entrantes dans le domaine sont imposées ; les variables caractéristiques corrigées sont retraduites en variables conservatives. Cette approche, communément appelée NSCBC (pour *Navier-Stokes characteristic boundary condition*), a été développée par Poinso et Lele [121] et étendue dans AVBP aux écoulements multi-espèces par Lartigue [107].

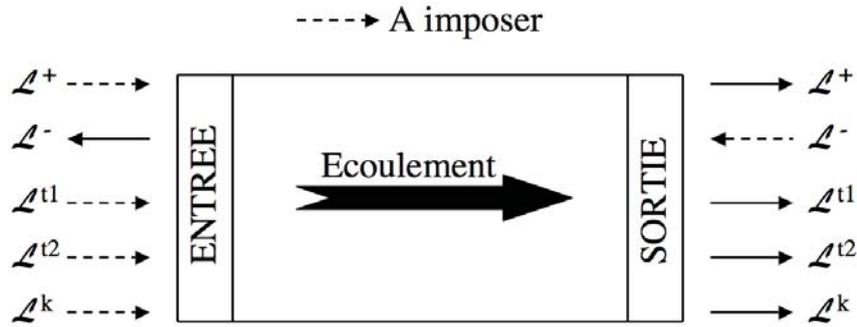


FIG. 3.7 - Décomposition en ondes aux conditions limites pour un écoulement subsonique multi-espèces.

En considérant une hypothèse LODI (*Local One Dimensionnal Inviscid*) qui néglige les dérivées transverses dans un repère relatif à la condition limite¹, on peut définir une relation entre les ondes (Fig. 3.7) et les variables primitives [123] :

$$\partial \mathcal{L}^+ = \partial P / \rho c + \partial u_n \quad (3.54)$$

$$\partial \mathcal{L}^- = \partial P / \rho c - \partial u_n \quad (3.55)$$

$$\partial \mathcal{L}^{t1} = \partial u^{t1} \quad (3.56)$$

$$\partial \mathcal{L}^{t2} = \partial u^{t2} \quad (3.57)$$

$$\partial \mathcal{L}^k = \partial \rho_k - \rho_k \partial P / \rho c^2 \quad (3.58)$$

où les ondes \mathcal{L}^\pm sont des ondes acoustiques qui se propagent à la vitesse $u_n \pm c$. Les ondes \mathcal{L}^{t1} et \mathcal{L}^{t2} sont des ondes de vorticit  qui se d placent   la vitesse de l' coulement qui traverse la condition limite. Les ondes \mathcal{L}^k sont des ondes associ es aux esp ces dont la somme m ne   l'onde entropique $\mathcal{L}^s = \partial \rho - \rho \partial P / \rho c^2$.

Les ondes entrantes doivent  tre impos es et la mani re dont elles le sont d termine le comportement acoustique de la condition limite. Pour un cas mono-dimensionnel, la variation de pression   la condition limite s' crit :

$$dP = \frac{\rho c}{2} (d\mathcal{L}^+ + d\mathcal{L}^-) \quad (3.59)$$

Si la pression est impos e directement   la sortie ($dP = 0$), la condition limite est compl tement r fl chissante d'un point de vue acoustique puisque le module du coefficient de r flexion de la condition limite (d fini comme le rapport de l'onde acoustique entrante sur l'onde qui sort) est  gal   $|\mathbf{A}| = |\partial \mathcal{L}^- / \partial \mathcal{L}^+| = 1$.

¹l'indice n correspond   la composante normale   la condition limite et l'indice t   celle tangentielle

Pour éviter la réflexion acoustique, une autre façon de tenir une pression P_{cible} en sortie est d'imposer l'onde entrante via une relaxation sur la pression (méthode LRM pour *Linear Relaxation Method* en anglais) :

$$\frac{d\mathcal{L}^-}{dt} = -\frac{2K_P}{\rho c} (P - P_{\text{cible}}) \quad (3.60)$$

où K_P correspond au coefficient de relaxation sur la pression.

Le comportement acoustique d'une telle méthode est alors démontré en reprenant l'étude de Selle *et al.* [137] :

- Considérons une perturbation harmonique de pression autour de la valeur cible p_{cible} :

$$P = P_{\text{cible}} + \hat{P} \exp(-i\omega t) \quad (3.61)$$

- Avec l'hypothèse de très petites perturbations ($\hat{P}/P_{\text{cible}} \ll 1$), la transformée de Fourier \mathcal{F} au premier ordre de l'onde entrante imposée $d\mathcal{L}^-/dt$ s'écrit :

$$\mathcal{F}\left(\frac{d\mathcal{L}^-}{dt}\right) = -\frac{2K_P}{\rho c} \hat{P} \quad (3.62)$$

- L'Eq. 3.59 permet d'écrire la transformée de Fourier au premier ordre de l'onde qui sort :

$$\mathcal{F}\left(\frac{d\mathcal{L}^+}{dt}\right) = -\mathcal{F}\left(\frac{d\mathcal{L}^-}{dt}\right) - \frac{2}{\rho c} i\omega \hat{P} \quad (3.63)$$

- A partir des Eqs 3.62 et 3.63, le coefficient de réflexion de la condition limite avec relaxation sur la pression de sortie prend une forme de filtre passe-bas du premier ordre :

$$\mathbf{A} = \frac{\mathcal{F}(d\mathcal{L}^-)}{\mathcal{F}(d\mathcal{L}^+)} = -\frac{1}{1 - i\frac{\omega}{K_P}} \quad (3.64)$$

Ainsi plus le relax est bas moins la condition limite est réfléchissante, en contrepartie plus le signal de pression imposé est déphasé par la condition limite. Si l'on cherche à avoir peu de réflexion de la part de la condition limite, une solution consiste à anticiper ce déphasage sur le signal de pression imposé (voir chapitre 8).

3.4.2 Les lois de paroi

Pour AVBP qui est un code avec un avancement explicite en temps, une simulation effectuée avec un maillage qui résout la couche limite rend le gain de temps de calcul entre une SGE et une DNS négligeable. Pour éviter ce problème, l'influence de la paroi peut être modélisée par des approches zonales de type hybride RANS/SGE [54] ou des lois de paroi [73]. Le code AVBP a été orienté sur l'approche loi de paroi [135] qui assume un certain nombre d'hypothèses [73] :

- on cherche une solution moyenne stationnaire (moyenne de Reynolds),
- l'écoulement est établi et les variables ne dépendent que de la direction normale à la paroi,
- le fluide est newtonien et ses propriétés thermodynamiques sont constantes,
- le gradient de pression est négligeable,
- le frottement total et le flux de chaleur total sont constants dans la couche limite,

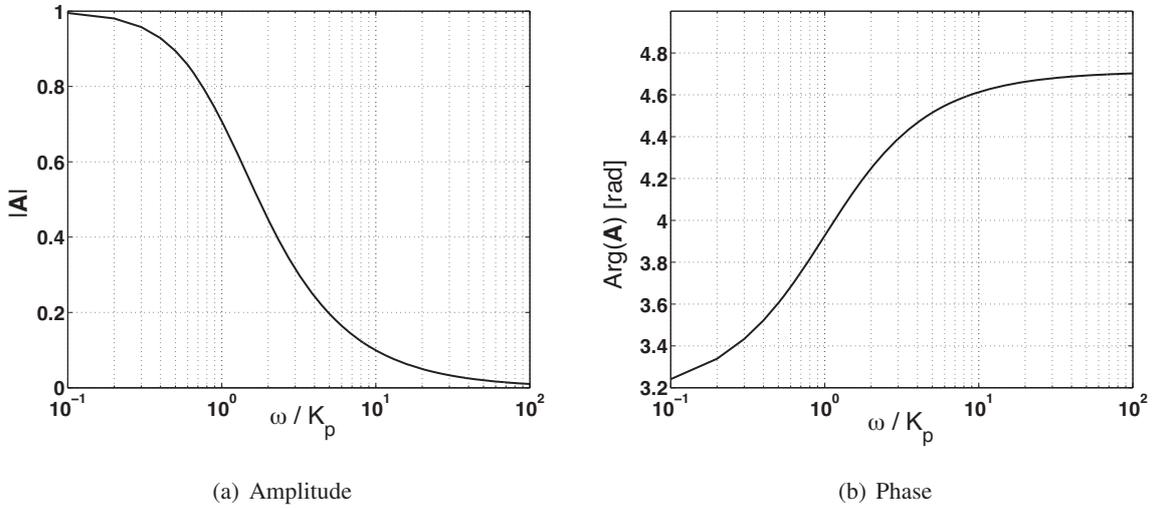


FIG. 3.8 - Coefficient de réflexion d'une condition limite en sortie qui suppose une relaxation sur la pression. Une amplitude de 1 correspond à un comportement complètement réfléchissant de la condition limite alors qu'une amplitude de 0 indique que la condition limite est non-réfléchissante.

- les tensions de Reynolds sont modélisées par l'hypothèse de Boussinesq et un modèle de longueur de mélange de Prandtl est utilisé pour la viscosité turbulente.

Sous ces conditions, la loi de paroi standard pour la vitesse s'écrit :

$$\begin{cases} u^+ = y^+ & \text{pour } y^+ < 11, \\ u^+ = \frac{1}{\kappa} \ln(y^+) + C & \text{pour } y^+ > 11, \end{cases} \quad (3.65)$$

$$\text{avec } y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu}, \quad u^+ = \frac{u}{u_\tau} \quad \text{et} \quad u_\tau = \sqrt{\frac{\tau_w}{\rho}}, \quad (3.66)$$

où u_τ est une vitesse de friction, τ_w est le frottement pariétal, la constante de von Karman est prise à $\kappa = 0.41$ et $C = 5.5$.

Les lois de paroi sont seulement valides dans un contexte de moyenne de Reynolds. En SGE explicite, où le pas de temps de la simulation est inférieur au temps de retournement des plus petits tourbillons, la justification de ces lois de paroi par une moyenne temporelle n'est plus valide. Cependant, la première cellule est 10 à 100 fois plus grande que l'échelle de Kolmogorov. Ainsi l'utilisation des lois de parois peut se justifier par une moyenne spatiale de l'écoulement dans la première cellule à la paroi.

Dans le code, l'application d'une loi de paroi se fait en quatre étapes principales :

- τ_w est tout d'abord déterminé par l'Eq. 3.65 avec un processus itératif ;
- une correction des contraintes dans la cellule adjacente à la paroi est réalisée : $\tau_{we} = \tau_w$. Cette correction est seulement appliquée pour le calcul des flux diffusifs aux noeuds de la paroi ;
- L'avancement en temps du schéma est effectué ;
- Le flux normal de chaleur à la paroi est mis à zéro si la condition est adiabatique.

Si la loi de paroi est isotherme, le flux normal est calculé à partir d'une température de référence du mur T_{ref} spécifiée par l'utilisateur et de la température T_b du premier point à la paroi :

$$q_{\text{paroi}} = \frac{\rho_{\text{ref}} C_{p,\text{ref}} u_{\tau} (T_{\text{ref}} - T_b)}{T^+}, \quad (3.67)$$

où ρ_{ref} et $C_{p,\text{ref}}$ sont les propriétés thermodynamiques du fluide déterminées à partir de T_{ref} . T^+ est déterminée par la loi de paroi de la couche limite thermique (WALL_LAW_ISOT dans AVBP 6.1) :

$$\begin{cases} T^+ = Pr y^+ & \text{pour } y^+ < y_T^+, \\ T^+ = \frac{Pr_t}{\kappa} \ln(y^+) + C_T(Pr) & \text{pour } y^+ > y_T^+, \end{cases} \quad (3.68)$$

où la constante $C_T(Pr)$ dépend du Prandtl laminaire et est calculée par la relation empirique proposée par Kader [71] définie à l'Eq. 3.69. La valeur de la distance à la paroi y_T^+ correspond à la valeur d'intersection des lois logarithmique et linéaire, valeur qui dépend du Prandtl laminaire.

$$C_T(Pr) = \left(3.85Pr^{1/3} - 1.3\right)^2 + 2.12 \ln(Pr) \quad (3.69)$$

Approche numérique

Le code AVBP a été développé dans le but d’avoir un solveur des équations de Navier-Stokes capable de supporter des maillages non-structurés et hybrides. Ce type de maillage assure une flexibilité maximale lors de la discrétisation de géométries complexes. Les méthodes numériques originellement implantées par Rudgyard et Schönfeld ont ainsi été orientées vers une méthode volumes finis de type *Cell-Vertex*. Les études de Rudgyard [131] et Morton *et al.* [105] ont montré que cette approche est précise et plus robuste aux distorsions du maillage que des approches volumes finis *Cell-Centered* et *Vertex-Centered*.

Dans ce chapitre la méthode *Cell-Vertex* est brièvement présentée en section 4.1. Dans AVBP, cette méthode est associée à des schémas de convection centrés présentés en section 4.2. Ces schémas souffrent d’oscillations hautes fréquences et nécessitent l’utilisation de viscosité artificielle décrite en section 4.4. Ce chapitre présente également la méthode ALE utilisée pour le mouvement de maillage (section 4.5), la méthode de capture de choc pour traiter les discontinuités aux ouvertures soupapes (section 4.6) ainsi que les conditions limites utilisées pour modéliser le banc moteur (section 3.4).

4.1 Discrétisation du domaine : une approche *Cell-Vertex*

Cette section décrit succinctement l’approche numérique qui a servi à réaliser les SGE de ce travail. Si l’on considère une formulation compacte des équations de Navier-Stokes compressibles, en omettant les termes sources pour plus de simplicité, on obtient :

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F} = \mathbf{0} \quad (4.1)$$

où \mathbf{w} est le vecteur des variables conservatives et \mathbf{F} est le tenseur des flux.

La première étape consiste à décomposer le domaine de calcul en volumes de contrôle qui le discrétisent.

tisent complètement :

$$\Omega = \bigcup_{\Omega_e \in T_h} \Omega_e \quad (4.2)$$

L'intégration spatiale de l'Eq. 4.1 et l'utilisation du théorème de Green-Gauss mènent à :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} \mathbf{w} \, dv + \oint_{\partial\Omega} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, ds = 0 \quad (4.3)$$

En volumes finis, le choix du volume de contrôle sur lequel les lois de conservation sont intégrés varient selon la méthode. Pour une formulation volumes finis avec une méthode *Cell-Vertex*, les variables conservatives sont stockées aux noeuds et le volume de contrôle correspond à la cellule primale. Cette méthode nécessite donc de distribuer l'information des noeuds vers les centres des cellules et réciproquement. Une illustration de cette approche est donnée en Fig. 4.1.

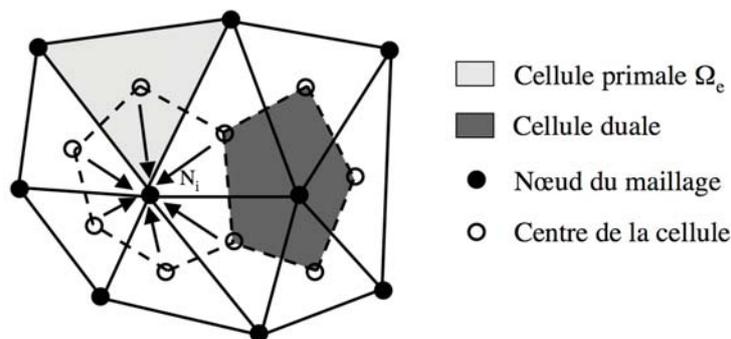


FIG. 4.1 - Méthode cell-vertex : les variables sont stockées aux noeuds du maillage et le volume d'intégration correspond à la cellule primale. Afin de réaliser l'avancement en temps du noeud N_i , les contributions (ou résidus) des cellules adjacentes à ce noeud sont sommées (opération scatter).

Le résidu de chaque volume de contrôle Ω_e est défini par :

$$\mathbf{r}_{\Omega_e} = \frac{1}{V_e} \int_{\Omega_e} \nabla \cdot \mathbf{F} \, dv = \frac{1}{V_e} \int_{\partial\Omega_e} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} \, ds \quad (4.4)$$

avec V_e le volume de l'élément Ω_e . Le calcul du résidu requiert donc la définition du vecteur normal \mathbf{n} et une approximation numérique des flux. Pour AVBP, les vecteurs normaux sont définis aux noeuds du volume de contrôle comme l'opposé de la somme des vecteurs normaux aux faces \mathbf{s}_f :

$$\mathbf{s}_j = - \sum_{f \in \mathcal{F}} \frac{n_d^f}{n_v^f} \mathbf{s}_f \quad (4.5)$$

avec n_d et n_v^f respectivement le nombre de dimensions et le nombre de noeuds de la face f . Les normales des faces sont pondérées par l'aire de la face et les normales des noeuds sont orientées vers l'intérieur du

volume de contrôle. L'évaluation des flux aux noeuds des éléments revient à une moyenne linéaire des flux à travers les faces des éléments :

$$\sum_{f \in \Omega_e} \left(\sum_{j \in f} \frac{1}{n_v} \mathbf{F}_j \right) \mathbf{s}_f = -\frac{1}{n_d} \sum_{j \in \Omega_e} \mathbf{F}_j \cdot \mathbf{s}_j \quad (4.6)$$

Des Eqs. 4.4 et 4.6, l'approximation numérique du résidu s'écrit :

$$\mathbf{r}_{\Omega_e} = -\frac{1}{n_d V_e} \sum_{j \in \Omega_e} \mathbf{F}_j \cdot \mathbf{s}_j \quad (4.7)$$

Le volume V_e est évalué en utilisant la relation $\nabla \cdot \mathbf{x} = n_d$:

$$V_e = \frac{1}{n_d^2} \sum_{j \in \Omega_e} \mathbf{x}_j \mathbf{s}_j \quad (4.8)$$

Afin d'avancer en temps le noeud i , une moyenne des résidus des cellules qui partagent ce noeud est effectuée :

$$\mathcal{R}_i = \frac{1}{V_i} \sum_{\Omega_e \cap C_i \neq \emptyset} \mathbf{D}_{i,e} \mathbf{r}_{\Omega_e} V_e \quad (4.9)$$

où V_i est le volume de la cellule duale C_i du noeud i , et $\mathbf{D}_{i,e}$ correspond à la matrice de distribution des résidus. Avec une forme semi-discrète, l'Eq. 4.1 devient :

$$\frac{\partial \mathbf{w}_i}{\partial t} = -\mathcal{R}_i \quad (4.10)$$

La discrétisation de la matrice de distribution des résidus dépend du schéma numérique qui est utilisé.

4.2 Schémas numériques

Seules les caractéristiques principales des schémas numériques utilisés dans cette étude sont présentées ici. Pour plus de détails sur la discrétisation des schémas implantés dans AVBP, le lecteur pourra se référer à la thèse de N. Lamarque [84] et les références indiquées.

Schéma Lax-Wendroff [85] : de type volumes finis, combinant discrétisations temporelle et spatiale.

Ce schéma est centré d'ordre 2 en espace, moins précis que le schéma TTGC¹ mais environ deux fois et demi plus rapide. On notera qu'une version éléments finis est également disponible dans AVBP ;

Schéma TTG4A [37] : de type éléments finis, il possède une précision d'ordre 3 en temps et en espace.

Ce schéma est plus diffusif que le schéma TTGC mais aussi plus stable, pour un coût de calcul comparable. L'avantage de ce schéma Taylor-Galerkin comparé à un schéma d'ordre 2 est une diminution significative de l'erreur de dispersion, cependant le coût de calcul est multiplié par un facteur 2.5.

¹le schéma TTGC [31] de type éléments finis est d'ordre 3 en temps et en espace. Il est le schéma le plus précis dans AVBP.

4.3 Avancement en temps

Les schéma Lax-Wendroff et TTG4A combinent une discrétisation spatiale et temporelle. Pour Lax-Wendroff, la forme discrète de l'Eq. 4.1 s'écrit [84] :

$$\mathbf{w}_i^{n+1} = \mathbf{w}_i^n - \frac{1}{V_i} \sum_{\Omega_e \cap C_i \neq \emptyset} \mathbf{D}_{i,e} \mathbf{r}_{\Omega_e} V_e \Delta t \quad (4.11)$$

En ce qui concerne le schéma TTG4A, la notation est très similaire puisqu'elle combine également une discrétisation spatiale et temporelle par une expansion de Taylor à l'ordre 3 avec une structure deux étapes. La première étape n'a pas de sens physique et est seulement requise pour atteindre une précision temporelle désirée dans la seconde étape. Cette dernière corrige l'avancement de la première étape pour obtenir l'avancement final. Cette structure permet seulement de monter l'ordre de l'expansion en temps, et elle ne doit pas être confondue avec des schémas deux étapes de type prédiction/correction.

Pour les deux schémas, le pas de temps considéré pour l'avancement en temps correspond au minimum de trois différents pas de temps :

- le pas de temps chimique ;
- le pas de temps convectif ;
- le pas de temps diffusif.

Le pas de temps chimique est défini par la relation suivante :

$$\Delta t_{\text{chimie}} = \chi \min_i \left(\min_k \frac{\rho_k}{|\dot{\omega}_i^k|} \right) \quad (4.12)$$

où χ est un seuil fixé par l'utilisateur pour éviter des erreurs liées à des termes sources très "raides" (en général $\chi = 0.1$), et $\dot{\omega}_i^k$ est le terme source de l'espèce k associé au noeud i .

Les deux autres pas de temps sont définis pour garantir la stabilité numérique de la simulation. Le pas de temps convectif doit assurer la stabilité du schéma numérique de convection en respectant le nombre de Courant ou CFL (pour Courant-Friedrichs-Lewy) :

$$\Delta t_{\text{convectif}} = \min_i \left(\text{CFL} \frac{V_i^{1/3}}{\|\mathbf{u}_i\| + c_i} \right), \quad (4.13)$$

où $\|\mathbf{u}_i\|$ et c_i sont respectivement la norme de la vitesse et la vitesse du son. Le nombre de CFL est fixé à 0.7.

Le pas de temps diffusif doit respecter un critère sur le nombre de Fourier F qui doit être inférieur à une valeur critique pour assurer la stabilité du schéma de diffusion, soit $F \leq F_c$. En 1D, $F = D\Delta t / \Delta x^2$ et cette condition se traduit par :

$$\Delta t \leq \frac{F_c \Delta x^2}{D}, \quad (4.14)$$

où D est un coefficient de diffusion et Δx le pas d'espace du maillage.

Pour le 3D, par analogie du 1D et en remplaçant le pas d'espace par une estimation d'une longueur

caractéristique, le pas de temps diffusif du domaine de calcul est défini par :

$$\Delta t_{\text{diffusif}} = \min_{\Omega_e \in T_h} \left(\frac{F_c}{D} \frac{2V_e^2}{\frac{1}{n_d^2} \sum_{j \in \Omega_e} A_j^2} \right), \quad (4.15)$$

avec un nombre de Fourier critique F_c égal à 0.5 (valeur de stabilité pour un cas mono-dimensionnel) et A_j les aires des faces de l'élément Ω_e .

En pratique, pour la plupart des écoulements calculés, il s'avère que l'intégration temporelle explicite du code est réalisée avec le pas de temps convectif car il est le plus limitant (i.e. le plus petit des trois). Dans les calculs présentés par la suite, la seule exception correspond à la phase d'allumage par dépôt d'énergie (chapitre 6) qui en raison des forts gradients induits sur le terme source chimique est contrôlée par le pas de temps chimique.

4.4 Viscosité artificielle

Dans AVBP, les schémas numériques pour la convection sont centrés en espace (cf. section 4.2). Ces schémas sont connus pour être naturellement sujet à des oscillations hautes fréquences (*wiggles*) générées dans les régions de forts gradients. Ces oscillations doivent être supprimées puisque elles n'ont aucun sens physique et elles dégradent la stabilité numérique. Ce problème est alors limité efficacement en introduisant un terme de *viscosité artificielle* (VA) du deuxième ordre pour adoucir les gradients trop raides et les oscillations hautes fréquences, et un terme d'hyperviscosité du quatrième ordre. L'équation 4.10 devient alors :

$$\frac{\partial \mathbf{w}_i}{\partial t} = -\mathcal{R}_i + \mathbf{d}_i^2 + \mathbf{d}_i^4 \quad (4.16)$$

La viscosité artificielle du deuxième ordre est basée sur un Pseudo-Laplacien comme suit :

$$\mathbf{d}_i^2 = \frac{1}{V_i} \sum_{\Omega_e \cap C_i \neq \emptyset} \frac{\epsilon^2 \zeta V_e}{n_v^e \Delta t} (\mathbf{w}_i - \mathbf{w}_e), \quad (4.17)$$

où ζ est un senseur compris entre 0 et 1 défini pour chaque cellule Ω_e qui sert à détecter où de la VA doit être appliquée. Dans le cas où la solution est bien résolue, le senseur est égal à 0 alors que dans le cas où la solution comporte de fortes oscillations spatiales, le senseur vaut 1 et la VA est appliquée.

Dans AVBP, deux senseurs sont disponibles :

- le senseur de **Jameson** [65] : le senseur de Jameson ζ^{Jameson} est le maximum de tous les senseurs ζ_j^{Jameson} liés aux sommets j de l'élément Ω_e qui sont définis par l'Eq. 4.18. Ces senseurs se basent sur deux évaluations différentes du gradient d'un scalaire B (Δ_1^j, Δ_2^j) définies par l'Eq. 4.19. Δ_1^j mesure la variation de B au sein de la cellule Ω_e . Δ_2^j est une estimation de la même grandeur en utilisant $(\nabla B)_j$, le gradient de B au noeud j . Ce senseur varie proportionnellement à l'amplitude de la déviation par rapport à l'évolution linéaire. Il possède ainsi une évolution douce d'un point

de vue numérique particulièrement adaptée aux cas quasi-stationnaires.

$$\zeta_j^{Jameson} = \frac{|\Delta_1^j - \Delta_2^j|}{|\Delta_1^j| + |\Delta_2^j| + |B_j|} \quad (4.18)$$

$$\Delta_1^j = B_{\Omega_e} - B_j \quad \Delta_2^j = (\nabla B)_j \cdot (\mathbf{x}_{\Omega_e} - \mathbf{x}_j) \quad (4.19)$$

- le senseur de **Colin** : pour des écoulements fortement instationnaires, il est nécessaire de se munir d'un senseur qui limite l'application de la viscosité dans des zones de vorticit  sous r solv es, i.e. des zones o  les petites  chelles turbulentes sont r solv es sur peu de points. Ce senseur se base  galement sur les deux  valuations diff rentes du gradient d'un scalaire (Δ_1^j, Δ_2^j) qui permettent de distinguer une oscillation physique d'une oscillation num rique [29].

L'hyperviscosit  du quatri me ordre s' crit :

$$\mathbf{d}_i^4 = \frac{1}{V_i} \sum_{\Omega_e \cap C_i \neq \emptyset} \frac{\epsilon^4 V_e}{n_v^e \Delta t} \left[\left(\frac{1}{n_v^e} \sum_{j \in \Omega_e} \nabla \mathbf{w}_j \right) \cdot (\mathbf{x}_i - \mathbf{w}_e) + (\mathbf{w}_e - \mathbf{w}_i) \right] \quad (4.20)$$

Cette viscosit  ne poss de pas de senseur et est appliqu e partout dans le domaine de calcul. Toutefois, elle n'est pas appliqu e sur la quantit  de mouvement afin de ne pas dissiper les petites structures turbulentes. Il est  galement important de noter que la valeur de ϵ^4  vite l'application de viscosit  d'ordre quatre dans les zones o  de la viscosit  d'ordre deux est appliqu e :

$$\epsilon^4 = \max(0, \epsilon^4 - \zeta \epsilon^2) \quad (4.21)$$

Pour les SGE du banc moteur pr sent es aux chapitres 8, 9 et 10, l'application de viscosit  d'ordre deux est d clench e par le senseur de Colin, et une minimisation de l'application de la viscosit  d'ordre quatre a  t  recherch e.

4.5 Maillage mobile : une m thode ALE

La simulation num rique du moteur   allumage command  fait intervenir de fortes d formations du domaine : le taux de compression est de 9.9, et les soupapes s'ouvrent et se ferment avec une lev e maximum de 8 mm. Le code de calcul et particuli rement les m thodes num riques doivent alors  tre adapt es pour traiter ces d formations pour fournir une r solution pr cise des fronti res mobiles ainsi que de l' coulement interne. Deux m thodes sont classiquement utilis es en m canique continue pour d crire le mouvement : la m thode Lagrangienne et la m thode Eul rienne. La description ALE (pour *Arbitrary Lagrangian-Eulerian* en anglais) a  t  d velopp e dans le but de combiner les avantages de ces deux m thodes classiques tout en minimisant leurs inconv nients. Cette m thode a initialement  t  propos e par Noh [112] et Hirt *et al.* [61].

Dans une description ALE, les noeuds de la grille de calcul peuvent  tre d plac es en suivant le mouvement d'un point mat riel telle une description Lagrangienne, rester fixes comme dans une description Eul rienne, ou  tre d plac es de fa on arbitraire comme montr  sur la Fig. 4.2. Gr ce   cette libert  de

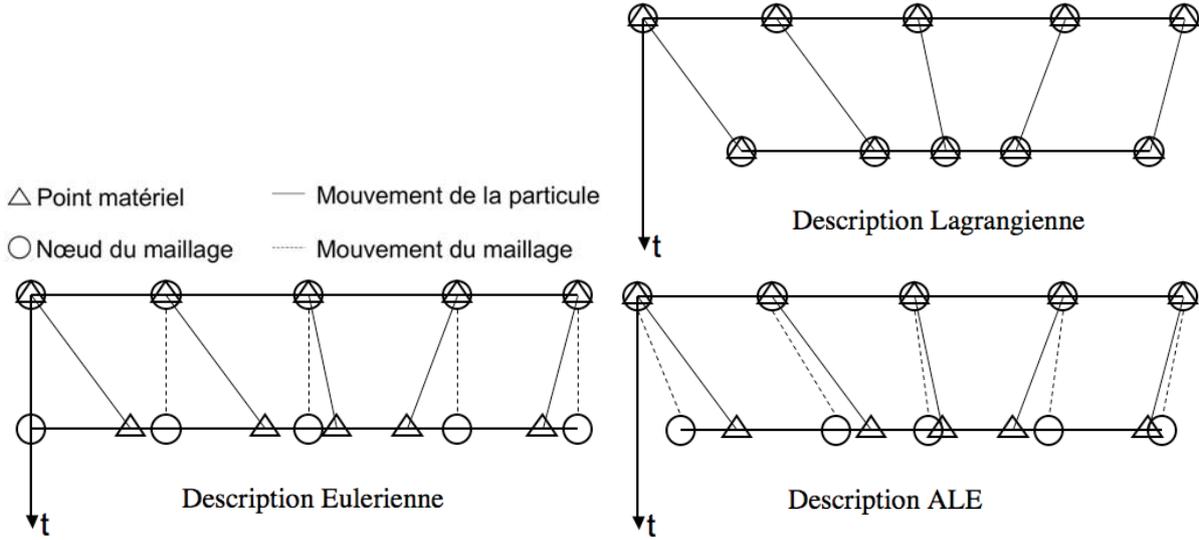


FIG. 4.2 - Exemple mono-dimensionnel des mouvements du maillage et des particules en Lagrangien, Eulerien et ALE

mouvement des noeuds, une plus grande distorsion du maillage est atteinte comparée au Lagrangien. Dans le code AVBP, la méthode ALE a été intégrée par Moureau [108]. En considérant les équations d'Euler (Eq. 4.22), l'intégration temporelle et spatiale en formulation ALE pour un schéma volume fini se décrit par l'Eq. 4.23 en utilisant le théorème de transport de Leibniz.

$$\frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{F}^I = 0 \quad (4.22)$$

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{V_i(t)} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} dv dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{V_i(t)} \nabla \cdot \mathbf{F}^I dv dt = 0$$

$$\int_{t^n}^{t^{n+1}} \frac{d}{dt} \int_{V_i(t)} \mathbf{w} dv dt + \int_{t^n}^{t^{n+1}} \int_{V_i(t)} \nabla \cdot (\mathbf{F}^I - \dot{\mathbf{X}} \mathbf{w}) dv dt = 0 \quad (4.23)$$

avec $\dot{\mathbf{X}}(\mathbf{x}, t)$ la vitesse de déplacement de chacun des noeuds du maillage. Cette vitesse est supposée constante au cours d'une itération.

L'intégration en temps et en espace du premier terme de l'Eq. 4.23 est immédiate et on aboutit à l'Eq. 4.24. En ce qui concerne le second terme de l'Eq. 4.23, son expression détermine le type de schéma utilisé.

$$V_i^{n+1} \mathbf{w}_i^{n+1} - V_i^n \mathbf{w}_i^n + \int_{t^n}^{t^{n+1}} Q_i(t) dt = 0 \quad (4.24)$$

$$\text{avec } Q_i(t) = \int_{V_i(t)} \nabla \cdot (\mathbf{F}^I - \dot{\mathbf{X}} \mathbf{w}) dv$$

Pour obtenir le schéma Lax-Wendroff volume-fini en formulation ALE (seul schéma utilisé par la suite sur maillage mobile), il faut tout d'abord effectuer un développement de Taylor au deuxième ordre de $Q_i(t)$ au voisinage de $t + \frac{\Delta t}{2}$:

$$\begin{aligned} \int_{t^n}^{t^{n+1}} Q_i(t) dt &= \int_{t^n}^{t^{n+1}} \left(Q_i^{n+\frac{1}{2}} + (t - t^{n+\frac{1}{2}}) \frac{dQ_i}{dt} + \mathcal{O}[(t - t^{n+\frac{1}{2}})^2] \right) dt \\ &= \Delta t Q_i(t^{n+1/2}) + \mathcal{O}[\Delta t^3] \\ &\approx \Delta t \int_{V_i(t+\frac{\Delta t}{2})} \nabla \cdot \left(\mathbf{F}^{I^{n+1/2}} - \dot{\mathbf{X}} \mathbf{w}^{n+1/2} \right) dv \end{aligned} \quad (4.25)$$

Ensuite pour que le schéma soit explicite, il faut exprimer $Q_i(t^{n+1/2})$ en fonction des flux et des variables conservatives au temps t^n soit :

$$\mathbf{w}^{n+1/2} = \mathbf{w}^n + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \mathbf{w}}{\partial t} \Big|_{t^n} + \frac{\Delta t}{2} (\dot{\mathbf{X}} \cdot \nabla) \mathbf{w}^n \quad (4.26)$$

$$\mathbf{F}^{I^{n+1/2}} = \mathbf{F}^{I^n} + \frac{\Delta t}{2} \frac{\partial \mathbf{F}^I}{\partial t} \Big|_{t^n} + \frac{\Delta t}{2} (\dot{\mathbf{X}} \cdot \nabla) \mathbf{F}^{I^n} \quad (4.27)$$

$$(4.28)$$

En introduisant la jacobienne \mathcal{A} , la formulation finale ALE intégrée en temps du schéma Lax-Wendroff volume-fini correspond à l'Eq. 4.29.

$$\begin{aligned} V_i^{n+1} \mathbf{w}_i^{n+1} - V_i^n \mathbf{w}_i^n &= -\Delta t \int_{V_i(t+\frac{\Delta t}{2})} \nabla \cdot (\mathbf{F}^{I^n} - \dot{\mathbf{X}} \mathbf{w}^n) dv \\ &+ \frac{\Delta t^2}{2} \int_{V_i(t+\frac{\Delta t}{2})} \nabla \cdot (\mathcal{A} - \mathbf{I} \dot{\mathbf{X}}) \left(\nabla \cdot (\mathbf{F}^{I^n} - \dot{\mathbf{X}} \mathbf{w}^n) + \mathbf{w}^n (\nabla \cdot \dot{\mathbf{X}}) \right) dv \end{aligned} \quad (4.29)$$

La vitesse de grille $\dot{\mathbf{X}}$ est connue en tout point si le déplacement de chacun des noeuds est connu. Dans AVBP, deux méthodes sont disponibles pour connaître le déplacement des noeuds de la grille :

- une loi de déplacement donnée par l'utilisateur qui définit pour chacun des noeuds de la grille le déplacement entre deux itérations.
- la loi donnée par l'utilisateur permet seulement de définir le déplacement des noeuds des frontières mobiles et celui des noeuds intérieurs est alors reconstruit grâce à un pseudo solveur de Laplace. Cette dernière méthode est appelée ITC pour *Interpolation Temporelle Conditionnée*.

Plus en détails, l'ITC nécessite pour une phase de calcul de mouvement de maillage, un maillage initial et un maillage cible de même connectivité. Ainsi, pour cette phase, le déplacement total $d_{i,total} = \|\mathbf{x}_i(t_{initial}) - \mathbf{x}_i(t_{final})\|$ de chaque noeud i est connu. Pour chaque itération, un pourcentage de déplacement est calculé :

$$P_i(t) = d_i(t) / d_{i,total} \quad (4.30)$$

où $d_i(t)$ est le déplacement réalisé pendant l'itération.

Pour les noeuds des frontières mobiles, ce pourcentage est connu puisque leurs mouvements sont imposés par les lois données par l'utilisateur. Pour les autres noeuds, les pourcentages sont estimés par un processus itératif basé sur un pseudo solveur de Laplace :

$$\Phi = \frac{\sum_{m=1}^M (1 - \Phi_m^2) \Phi_m}{\sum_{m=1}^M (1 - \Phi_m^2)} \quad (4.31)$$

où m est l'indice des noeuds voisins connectés par une face, M est le nombre total de noeuds voisins et Φ_i est un déplacement relatif lié à P_i par l'Eq. 4.32.

$$\Phi_i = \frac{P_i^n - P_i^{n-1}}{1 - P_i^{n-1}} \quad (4.32)$$

Pour un moteur à piston, les noeuds proches de la soupape et du piston ont ainsi un pourcentage de déplacement identique à celui de la surface dont ils sont le plus proches. Les noeuds à mi-distance des soupapes et du piston se voient attribuer un pourcentage de déplacement pondéré par le pourcentage de déplacement de chacune des surfaces mobiles.

Muni de l'ITC et de l'ALE, un calcul moteur se déroule comme illustré sur la Fig. 4.3. Lors d'une phase, la déformation des éléments évolue du maillage initial vers le maillage cible grâce à l'ITC qui détermine à chaque itération le déplacement des noeuds et leur vitesse de grille. Cette vitesse est alors intégrée dans la formulation ALE, méthode numérique qui permet l'avancement temporel des équations. En fin de phase, quand le maillage est jugé trop déformé, une interpolation sur le maillage initial de la phase suivante est réalisée pour poursuivre le calcul. Il a été remarqué que le maillage tétraédrique est fortement déformé quand le déplacement des surfaces mobiles excède environ 30% de la course ou de la levée de soupape du maillage initial. Pour la simulation du banc moteur F7P, cette gestion du maillage aboutit à 41 phases de calcul.

4.6 Traitement des chocs

Cette section décrit les modèles de viscosité artificielle existant dans le code AVBP pour traiter les discontinuités de choc. En effet, lors de l'ouverture des soupapes, des chocs peuvent exister pendant une période très courte. Dans une première partie, la problématique de la résolution des discontinuités de choc dans un écoulement de moteur à allumage commandé est brièvement présentée. La seconde partie présente les différentes méthodes en place dans AVBP pour traiter ces discontinuités. Les deux dernières parties montrent les principaux résultats obtenus par ces méthodes sur un tube à choc de Sod et un siège de soupape choquée 3D, identique aux sièges de soupapes présents sur le banc moteur mono-cylindre étudié par la suite.

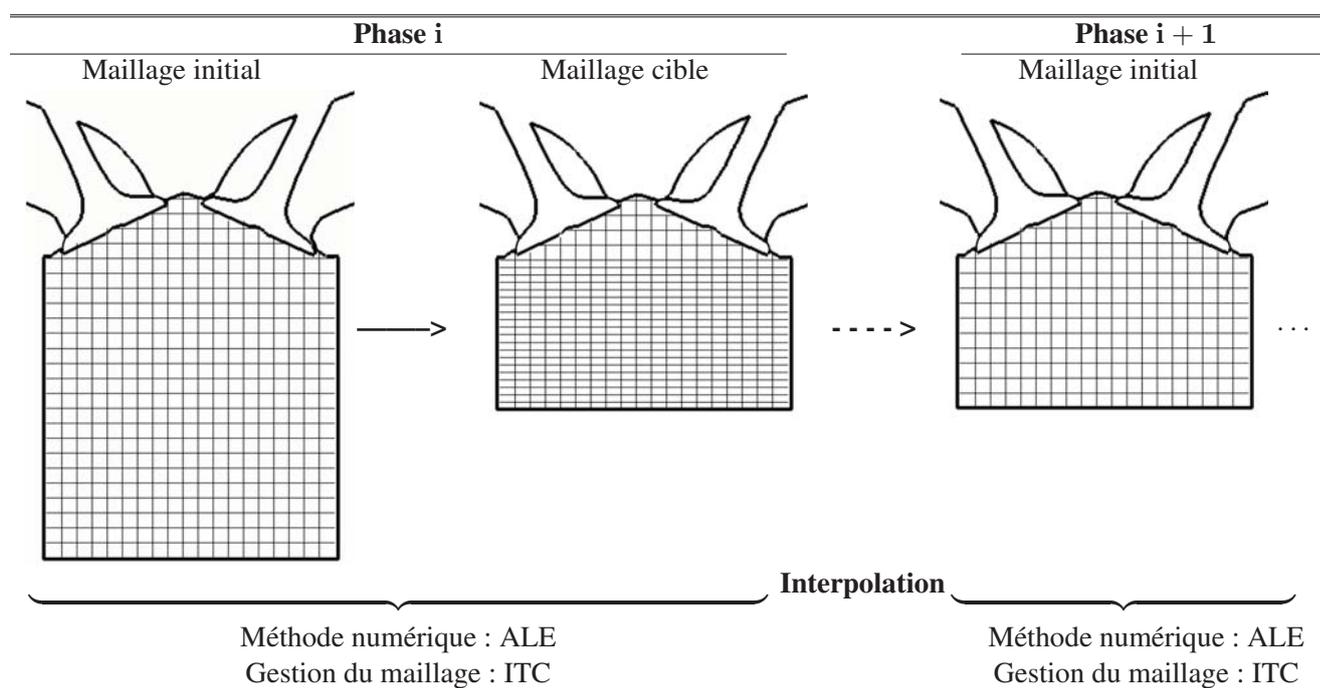
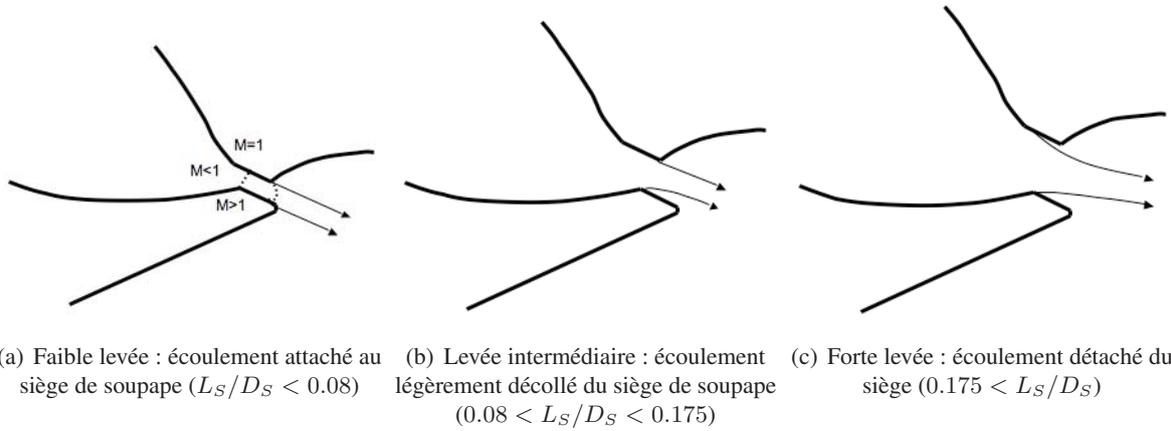


FIG. 4.3 - Déroulement d'un calcul moteur.

4.6.1 Problématique

Durant la phase d'admission ou d'échappement, l'écoulement dans le siège de soupape peut avoir différents régimes (Fig. 4.4) suivant le ratio entre la levée de la soupape (L_S) et le diamètre de la tête de soupape (D_S). A très faibles levées (Fig. 4.4(a)), pour des rapports de pression supérieurs à 2 entre les conduits et le cylindre, l'écoulement devient choqué ce qui fixe le débit et joue ainsi sur le remplissage pendant quelques degrés vilebrequins. Dans AVBP, ces forts gradients de vitesse doivent alors être bien prédits par les schémas centrés sans apparition d'oscillations numériques. L'utilisation de viscosité artificielle du second et du quatrième ordre appliquées localement et en faible quantité [65, 33] a montré son potentiel et son efficacité pour stabiliser les schémas centrés en SGE pour des écoulements en configurations industrielles. Cependant, elle reste inefficace sur une ouverture soupape où le nombre de points dans le siège est faible (< 10 à cause de levées très petites comprises entre 0.3 mm et 0.4 mm) avec l'apparition de gradients très forts. D'autres méthodologies doivent alors être mises en place. Dans le solveur AVBP, le choix s'est porté sur une méthodologie de capture de choc locale basée sur une viscosité de volume codés par Dauplain et Roux [35, 128]. Celle-ci permet de garantir la conservation de la masse et n'induit pas d'oscillations hautes fréquences au niveau du choc.

FIG. 4.4 - *Écoulements typiques pour différentes levées de soupape [59].*

4.6.2 Les méthodes de capture de choc d'AVBP

La viscosité de volume

La forme générale de l'équation de conservation de quantité de mouvement contient un terme σ représentant les contraintes subies par le fluide. Dans le cas d'un fluide newtonien, il se décompose sous la forme d'un terme de pression et du tenseur des contraintes visqueuses τ (Eq. 4.33) où interviennent les viscosités de cisaillement et de compression. Ce tenseur peut se réécrire en la somme d'une partie déviatrice (coefficients diagonaux nuls) et d'une partie diagonale comme le montre l'Eq. 4.35, en introduisant un coefficient de viscosité de volume $\kappa = \lambda + \frac{2}{3}\mu$.

$$\sigma = \tau - p.\delta \quad (4.33)$$

$$\tau = \underbrace{2\mu\mathbf{S}}_{\text{Viscosité de cisaillement}} + \underbrace{\lambda\nabla.\mathbf{u}}_{\text{Viscosité de compression}} \quad (4.34)$$

$$\tau = \underbrace{2\mu\mathbf{S} - \frac{2}{3}\mu\nabla.\mathbf{u}}_{\text{Partie déviatrice}} + \underbrace{\left(\lambda + \frac{2}{3}\mu\right)\nabla.\mathbf{u}}_{\text{Partie diagonale}} = 2\rho\nu\left(\mathbf{S} - \frac{1}{3}\nabla.\mathbf{u}\right) + \kappa\nabla.\mathbf{u} \quad (4.35)$$

Pour des conditions de pression et de température proches des conditions standards, l'hypothèse de Stokes est appliquée et la viscosité de volume κ est nulle.

Modèle de Von Neumann et Richtmeyer

Cette méthode qui date des années 1950 [164] a pour idée d'épaissir le choc grâce à la partie diagonale de $\boldsymbol{\tau}$ afin de le résoudre explicitement sur le maillage. Le tenseur des contraintes visqueuses est alors modifié par l'ajout d'un terme κ_{VNR} semblable à une viscosité de compression :

$$\boldsymbol{\tau}_{\text{VNR}} = \rho \nu \left(\boldsymbol{S} - \frac{1}{3} \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right) + \kappa_{\text{VNR}} \nabla \cdot \boldsymbol{u} \quad (4.36)$$

$$\text{avec } \kappa_{\text{VNR}} = C_{\text{VNR}} (V_e)^{2/3} \rho \sqrt{(\nabla \cdot \boldsymbol{u})^2} \quad (4.37)$$

La pression est ainsi modifiée par $P' = -\kappa_{\text{VNR}} \nabla \cdot \boldsymbol{u}$ où κ_{VNR} dépend de la divergence de \boldsymbol{u} , de la taille de la cellule et de la densité. La valeur optimale de la constante C_{VNR} est de 1.

Modèle de Cook et Cabot

Plus récemment, Cook et Cabot [32] ont proposé un modèle de viscosité de volume permettant de traiter les chocs avec une approche comparable à celle de Von Neumann et Richtmeyer. La différence majeure avec l'approche précédente est la façon de calculer le coefficient de viscosité de volume :

$$\boldsymbol{\tau}_{\text{Cook}} = \rho \nu \left(\boldsymbol{S} - \frac{1}{3} \nabla \cdot \boldsymbol{u} \right) + \kappa_{\text{Cook}} \nabla \cdot \boldsymbol{u} \quad (4.38)$$

$$\text{avec } \kappa_{\text{Cook}} = C_{\text{Cook}} (V_e)^{4/3} \rho \widetilde{|\nabla^2 \boldsymbol{S}|} \quad (4.39)$$

où \boldsymbol{S} est la partie symétrique du tenseur des contraintes visqueuses, l'opérateur $\widetilde{}$ représente un filtre gaussien tronqué (approximé dans AVBP par une moyenne sur les cellules) éliminant les hautes fréquences dues à la valeur absolue. La constante C_{Cook} est fixée à 5 [32].

Comme pour le modèle de Von Neumann et Richtmeyer, ce terme de pression supplémentaire s'apparente à une diffusion qui aura pour effet d'épaissir le choc. Cependant, l'avantage de la formulation de Cook par rapport à la précédente concerne les zones où la diffusion est appliquée : elle est très grande dans la zone de choc où le schéma numérique peine mais elle reste très faible dans les zones où la divergence est proche de zéro, zone où aucune viscosité additionnelle est nécessaire.

4.6.3 Application des deux méthodes au tube à choc

Cette expérience numérique simule le cas d'un tube 1D contenant un diaphragme séparant deux zones à des états différents :

$$\begin{aligned} U &= U_G, P = P_G, T = T_G, & \text{pour } x < x_0, \text{ et } t = 0 \\ U &= U_D, P = P_D, T = T_D, & \text{pour } x > x_0, \text{ et } t = 0 \end{aligned}$$

A $t = 0$, le diaphragme est retiré ce qui provoque l'apparition d'une onde de choc qui se propage dans la zone du tube où la pression est la plus faible (Fig. 4.5). A chaque instant après le retrait du diaphragme, l'état dans le tube peut être défini par une solution analytique.

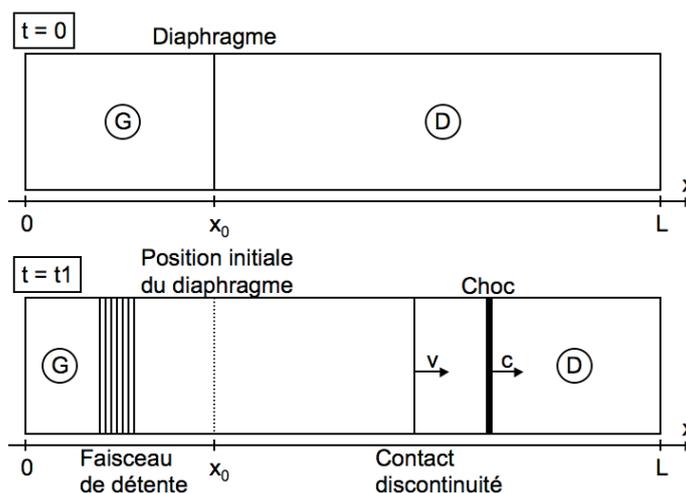


FIG. 4.5 - Configuration du tube à choc.

Les résultats présentés sont basés sur des calculs avec le schéma TTG4A sans viscosité artificielle additionnelle du second ou du quatrième ordre. La pression à gauche est $P_G = 100\,000 Pa$ et à droite $P_D = 1\,000 Pa$. Le maillage 2D, composé d'éléments triangulaires, comporte 500×2 noeuds avec des périodicités en haut et en bas. Trois types de viscosités artificielles ont été testées sur ce problème :

- la solution avec la viscosité artificielle de Jameson (cf. section 4.4) ;
- la solution avec la viscosité artificielle de Von Neumann Richtmeyer (VNR) ;
- la solution avec la viscosité artificielle de Cook.

Chacun des résultats est comparé à la solution analytique de Riemann. La Figure 4.6 présente une comparaison sur l'évolution de la vitesse axiale, de la pression, de la température et de la densité le long de l'axe du tube à choc, $6 ms$ après la rupture du diaphragme, entre la solution analytique de Riemann et la simulation avec le senseur de Cook.

Entre les trois types de viscosité, des différences notables sont à observer dans les zones de détente et de choc :

- dans la zone de choc, la Fig. 4.7 montre que la dispersion est plus faible avec les viscosités de volume, et que la méthode de Cook donne de meilleurs résultats que la viscosité VNR. En effet la pression qui résulte de la viscosité de Cook est bien plus large et bien plus forte que celle de VNR, ce qui explique que la solution de Cook ne disperse pas et qu'aucune valeur non physique n'apparaisse.
- pour la zone de détente, zone où la viscosité ne doit pas se déclencher, la Fig. 4.8 met en évidence que la viscosité de Cook ne s'applique pas contrairement à celle de VNR qui est non nulle.

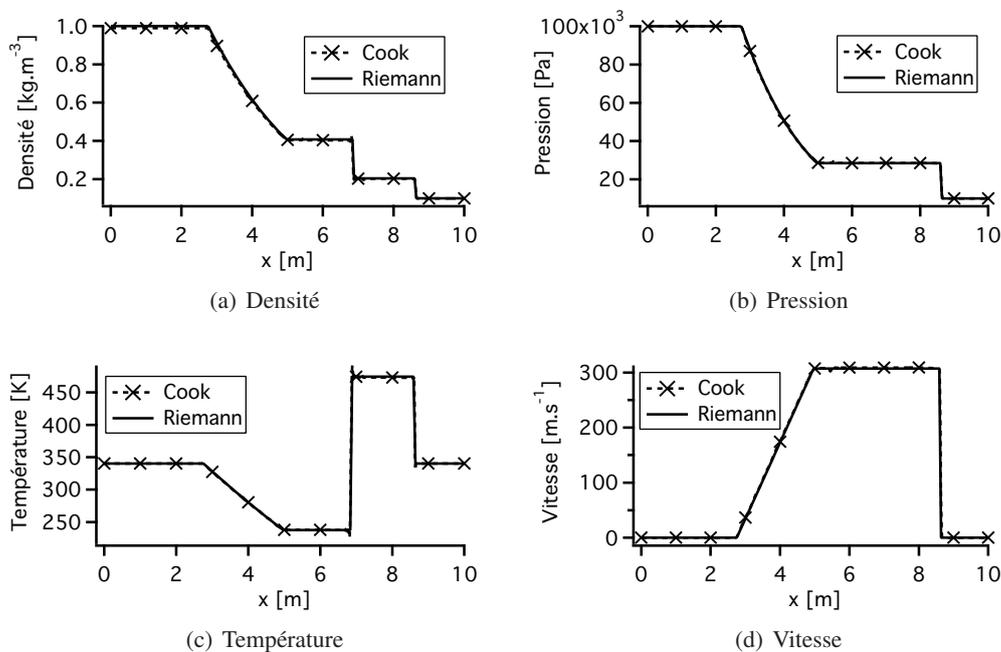


FIG. 4.6 - Test du tube à choc avec 500 points suivant x . Profils de densité, de pression, de température et de vitesse à $t = 6$ ms après le retrait du diaphragme.

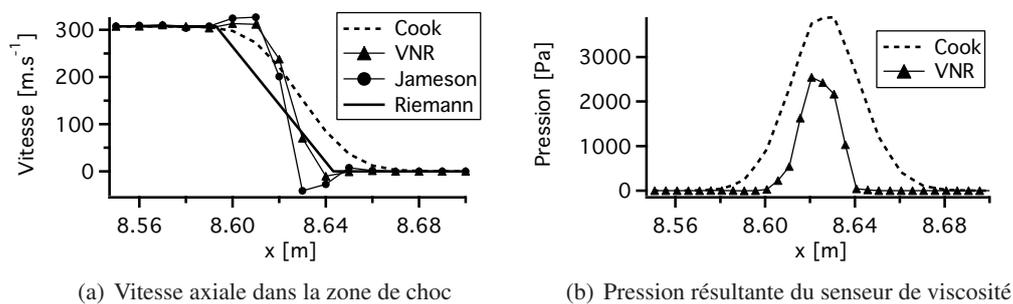
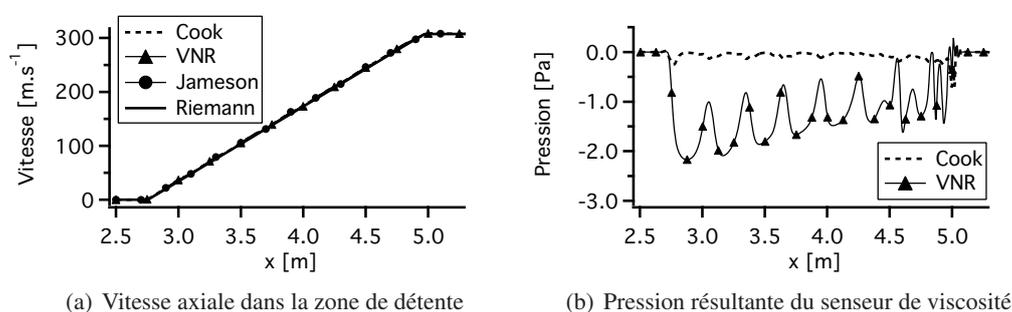


FIG. 4.7 - Comparaison des méthodes de viscosité dans la zone de choc.



(a) Vitesse axiale dans la zone de détente

(b) Pression résultante du capteur de viscosité

FIG. 4.8 - Comparaison des méthodes de viscosité dans la zone de détente.

4.6.4 Calcul d'une soupape ouverte à très faible levée

La géométrie de la configuration calculée correspond à la géométrie d'un siège de soupape d'échappement que l'on trouve sur le banc moteur F7P, avec une soupape à levée fixe. Elle se compose d'une partie de la pipe d'échappement accolée à un cylindre d'un rayon bien supérieur à celui du conduit afin d'éviter l'influence des parois de ce volume. Les conditions thermodynamiques imposées sur cette configuration, Fig. 4.9, sont très proches de celles rencontrées à l'ouverture d'échappement sur le point de fonctionnement *moteur entraîné stab_ref* : une pression dans la pipe de $P_p = 102\,000 \text{ Pa}$ et une pression chambre de $P_c = 50\,000 \text{ Pa}$. De par la faible levée de la soupape ($L_s = 1 \text{ mm}$), le siège de soupape est ainsi amorcé avec la présence d'un choc. Cette configuration est stationnaire en moyenne : le débit injecté par la soupape sort par le cylindre.

Trois maillages composés d'éléments tétraédriques et possédant des résolutions différentes du siège de soupape ont été testés sur cette configuration. Les paramètres de ces maillages sont détaillés dans la Tab. 4.1. En terme de conditions aux limites, le débit d'air est fixé en entrée de la pipe d'échappement et une condition caractéristique sur la pression (cf. section 3.4.1) est imposée sur la sortie de la chambre. Les murs sont modélisés par des lois de parois adiabatiques (cf. section 3.4.2).

	Taille de maille dans le siège [mm]	Nombre de noeuds	Nombre de cellules
Maillage M1	0.15	466 000	2 600 000
Maillage M2	0.11	861 000	4 805 000
Maillage M3	0.08	1 520 000	8 445 000

TAB. 4.1 - Caractéristiques des maillages utilisés dans le calcul d'une soupape d'échappement à faible levée.

Les différentes méthodes de traitement de choc ont été testées sur cette configuration. La viscosité artificielle de Jameson ainsi que la méthode VNR associées à un schéma Lax-Wendroff mènent à un échec du calcul ou à des valeurs non-physiques de température et pression. En effet, ces deux méthodes présentent un comportement inadapté dans la zone de détente. Seul le traitement du choc par la méthode

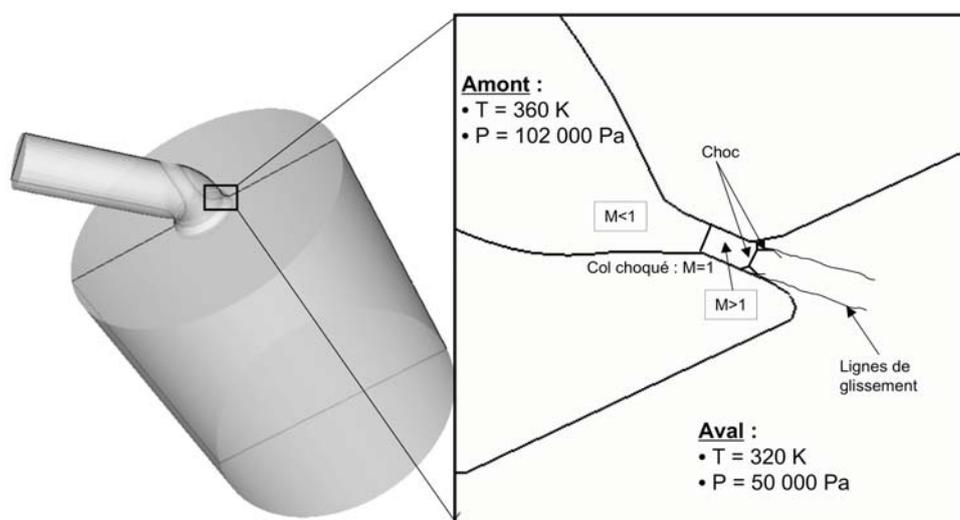


FIG. 4.9 - Configuration 3D d'une soupape d'échappement fixe à faible levée.

de Cook et Cabot conduit à une réussite de la simulation. La Figure 4.10 montre une coupe colorée par la

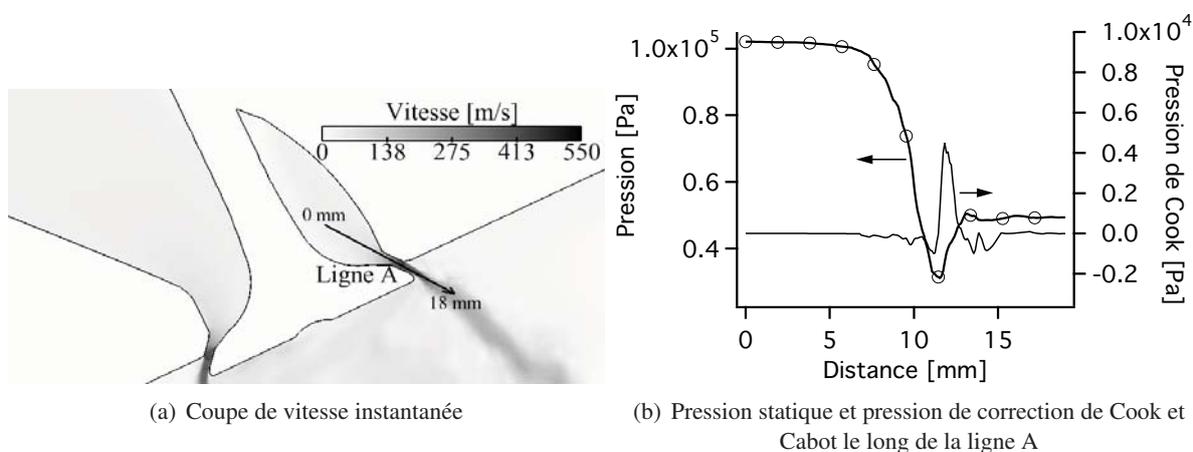


FIG. 4.10 - Visualisation du choc dans le siège de soupape et activité de la viscosité de volume de Cook et Cabot.

vitesse instantanée obtenue sur le maillage $M1$ ainsi que l'évolution spatiale instantanée de la pression, et de la pression résultante de la viscosité de Cook le long d'une ligne dans le siège de soupape. La pression liée à la viscosité de Cook est obtenue par $P_{Cook} = 4 \times 10^3 Pa$. On remarque que le traitement de la viscosité de volume est principalement localisé dans la zone de choc, et qu'il n'y a pas d'oscillations hautes fréquences sur la pression. En raffinant le siège de soupape, Fig. 4.11, le sensor tend à s'activer uniquement dans la zone de choc, et la pression résultante de Cook voit son niveau divisé par 2 sur le maillage $M3$. Ainsi le sensor de Cook et Cabot est bien adapté pour des écoulements intervenant dans

des sièges de soupape à faible levée pour deux raisons principales : l'activation de la viscosité de volume est locale et elle est d'autant moins forte que le choc est bien résolu.

Il est à noter que pour le calcul du moteur complet, c'est la résolution du maillage le plus grossier $M1$ qui a été retenue pour une question de temps CPU. En effet, sur un moteur tournant à 1200 tr/min , le rapport des temps de restitution sur 32 processeurs pour calculer $10^\circ V$ d'une soupape à faible levée entre le maillage intermédiaire ($M2$) et le maillage grossier ($M1$) serait de 2.5 (voir Table 4.2).

En sachant que le moteur expérimental est constitué de quatre soupapes (soupapes ouvertes deux par deux), soit deux fois plus de cellules, le choix s'est orienté naturellement vers le maillage le moins fin des trois.

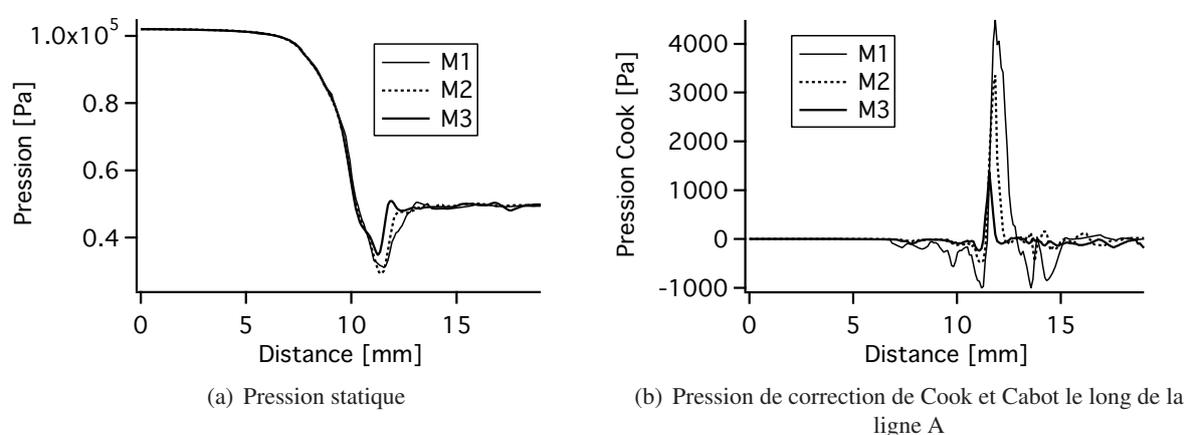


FIG. 4.11 - Influence de la résolution du maillage sur la viscosité de volume de Cook.

	Pas de temps Δt [μs]	Temps de restitution sur 32 processeurs de $10^\circ V$ d'un moteur à 1200 tr/min [h]
Maillage $M1$	$0.64 \cdot 10^{-2}$	3.7
Maillage $M2$	$0.47 \cdot 10^{-2}$	9.5
Maillage $M3$	$0.32 \cdot 10^{-2}$	24.5

TAB. 4.2 - Temps caractéristiques d'un calcul d'ouverture soupape suivant la résolution du maillage.

Cinétique chimique à 2 étapes propane-air

La cinétique chimique complète du propane fait intervenir un millier de réactions et des centaines d'espèces [75]. Dans un contexte de simulation aux grandes échelles, la combustion turbulente ne peut être décrite par ce type de mécanisme en raison de leur coût important. En effet chaque espèce nécessite une équation de transport et chaque réaction nécessite d'appréhender un taux de réaction.

Le coût en SGE est une issue primordiale et des méthodes telles que la tabulation ou la chimie réduite ont été proposées [43, 103]. L'idée de la première méthode consiste à réduire des mécanismes chimiques en tabulant, à partir de simulations de flamme laminaire 1D de chimie complexe, des taux de réactions et des compositions en fonction d'un set de données. Même si la puissance de ces méthodes a été démontrée dans des configurations industrielles [46], pour une configuration de moteur à allumage commandé la difficulté réside dans le nombre de paramètres à fournir en entrée des tables. La dimension de ces dernières peut augmenter assez rapidement puisqu'elles doivent potentiellement prendre en compte l'effet de la dilution, de la température des gaz frais ainsi qu'une montée en pression en plus des variables classiques (la fraction de mélange z et le taux d'avancement c). De plus, le choix de la structure de flamme 1D pour réaliser la tabulation peut s'avérer délicat si le régime de combustion n'est pas connue. Notre choix s'est alors orienté vers la deuxième méthode également peu coûteuse et plus simple, utilisée avec succès en SGE de turbine à gaz [129, 18, 135]. Elle consiste à résoudre directement la chimie dans la SGE via l'utilisation d'une cinétique chimique réduite [165, 70]. Pour cette méthode, uniquement les réactions prépondérantes sont conservées pour reproduire un certain nombre de propriétés choisies de la flamme (vitesse de flamme laminaire, température de flamme adiabatique). Cependant, les schémas réduits qui résultent de cette technique ont une plage de validité réduite en richesse, pression et température de combustion. Pour une simulation de moteur à combustion interne, ce dernier point peut être vu comme un désavantage, mais quelques ajustements simples des paramètres d'une cinétique réduite à deux étapes [45] (énergie d'activation, pré-exponentielle, ordre des réactions) permettent d'appréhender la large plage de pressions et températures des gaz frais rencontrées ($2 < P < 20 \text{ bar}$ et $500 < T < 1100 \text{ K}$).

Ce chapitre présente la construction et la validation d'un mécanisme réduit à deux étapes pour un pré-mélange propane-air à la stoechiométrie en vue d'une simulation du banc moteur F7P. Les deux pre-

mières parties présentent les données expérimentales ainsi que deux mécanismes détaillés auxquels seront confrontés les résultats de la chimie réduite. La méthode utilisée pour construire le schéma réduit à deux étapes est par la suite décrite en section 5.2. A l'aide du logiciel CANTERA [49], les résultats de ce mécanisme réduit portant sur la vitesse de flamme laminaire, la température de flamme adiabatique et le délai d'allumage sont présentés pour la plage de pression ($[5;25 \text{ bar}]$) et de température ($[700;1100 \text{ K}]$) rencontrées sur le point *stab_ref* du banc moteur. Avec une forte dilution des gaz frais par de l'azote, il est montré que ce schéma ne convient plus et une nouvelle cinétique réduite est proposée. Enfin, l'implantation des cinétiques réduites dans AVBP et leur couplage au modèle de combustion DTFLES sont décrits.

5.1 Données disponibles

Les flammes de prémélange propane-air, en particulier leurs vitesses de flamme laminares, ont été étudiées largement pour des variations de richesse à condition thermodynamique atmosphérique [136, 77, 114, 101]. Cependant peu de données expérimentales existent sur les vitesses de flamme rencontrées dans la gamme de variation de pression et de température rencontrée dans un moteur à allumage commandé. Pour un mélange propane-air à la stoechiométrie, les seules données expérimentales existantes sur une plage de pression assez large sont les travaux de Metghalchi et Keck [101]. Ainsi la construction du mécanisme à deux étapes se basera sur ces résultats. Pour donner plus de poids à la validation du mécanisme réduit, ses résultats seront confrontés à deux mécanismes complexes.

5.1.1 Les données expérimentales

Les expériences utilisées pour la validation du schéma réduit sont celles de Metghalchi et Keck [101], où les vitesses de flamme d'un mélange propane-air ont été mesurées en bombe à volume constant. Ces vitesses de flamme laminares ont été mesurées sur une plage de pression de 0.4 à 40 *atm* et sur une gamme de température de 298 à 750 *K* pour des richesses variant de 0.8 à 1.5. De leurs résultats, ils déduisent une corrélation de la vitesse de flamme en fonction de la pression P et de la température T^{GF} des gaz frais dont la forme est une simple loi puissance définie par l'Eq. 5.1.

$$S_L = S_L^0 \left(\frac{T^{GF}}{T_0} \right)^{\alpha_{Keck}} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\beta_{Keck}}, \quad (5.1)$$

où $T_0 = 298 \text{ K}$ et $P_0 = 1 \text{ atm}$ sont la température et pression de référence, et S_L^0 , α_{Keck} , β_{Keck} sont des constantes ajustées suivant la richesse. Pour un mélange à la stoechiométrie, $S_L^0 = 31.9 \text{ cm.s}^{-1}$, $\alpha_{Keck} = 2.13$ et $\beta_{Keck} = -0.17$.

Dans le cadre de la simulation SGE du banc moteur F7P, la température des gaz frais à l'allumage se situe aux alentours de 720 *K*. Par la suite, pendant la compression, la température des gaz frais dépasse les 1000 *K*. La corrélation de Metkalchi et Keck est ainsi en dehors des bornes de sa validation. Par manque de données, cette corrélation est par la suite tout de même utilisée par extrapolation.

Cette corrélation doit cependant être modifiée pour des mélanges comportant une forte dilution par des gaz inertes tels que du N_2 . Les résultats de Metghalchi et Keck [102] ont montré que le ratio entre la vitesse de flamme laminaire avec et sans dilution est proportionnel à la fraction molaire du diluant. La corrélation de Keck modifiée pour la dilution s'écrit alors :

$$S_L^{dil} = S_L^0 \left(\frac{T^{GF}}{T_0} \right)^{\alpha_{Keck}} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\beta_{Keck}} (1 - 2.1Y_{dil}) , \quad (5.2)$$

où Y_{dil} est la fraction massique du diluant.

5.1.2 Les mécanismes détaillés

Pour appuyer les vitesses de flamme propane-air extrapolées par la corrélation de Metghalchi et Keck [101], ainsi que pour estimer la température de flamme adiabatique et l'épaisseur de flamme, deux mécanismes détaillés ont été choisis pour la validation du schéma cinétique réduit :

- le mécanisme GRI-Mech 3.0 [144] ;
- le mécanisme de Jerzembeck *et al.* [66] comportant 669 réactions et 99 espèces.

Ce dernier mécanisme, dérivé des mécanismes détaillés *Lawrence Livermore* en iso-octane et n-heptane, a été validé pour des hautes pressions (de 10 à 25 *bar*) à une température de 373 *K* sur du n-heptane et de l'iso-octane. Cependant pour des alcanes plus légers comme du propane, la Fig 5.1 montre que les vitesses de propagation données par ce schéma sont en bon accord avec les vitesses expérimentales de Jomaas *et al.* [69] et de Vagelopoulos *et al.* [159], à pression atmosphérique et à une pression de 5 *atm*. Le schéma GRI-Mech 3.0 [144] donne quant à lui de moins bons résultats en surestimant pour chacune des pressions la vitesse de flamme laminaire.

La Fig. 5.2 montre une comparaison de ces deux schémas à des données expérimentales issues de la littérature sur l'effet de la température initiale du mélange sur la vitesse de flamme laminaire [40] à une pression de 1 *atm*. On s'aperçoit que, identiquement à la Fig. 5.1, le mécanisme de Jerzembeck *et al.* [66] prédit de façon correcte les vitesses de flamme alors que le mécanisme GRI-Mech 3.0 les surprédit.

Enfin ces schémas ont été testés sur leur aptitude à prédire la vitesse de flamme d'un mélange propane-air avec dilution de N_2 , le taux de dilution étant défini comme le volume du diluant sur le volume total. La Fig. 5.3 montre que comparativement aux mesures expérimentales de Zhao *et al.* [169], les meilleurs résultats sont une fois de plus obtenus par le mécanisme de Jerzembeck *et al.* [66]. Cependant à une dilution par N_2 de 40%, l'écart devient important entre le schéma de Jerzembeck *et al.* [66] et les résultats expérimentaux, en atteignant une différence de près de 40% sur la vitesse de flamme laminaire.

Cette première analyse montre que les effets de préchauffage des gaz frais, de dilution ou de pression sur la vitesse de flamme laminaire sont mieux pris en compte par le mécanisme de Jerzembeck *et al.* [66] que par le GRI-Mech 3.0 [144]. Par la suite, le mécanisme réduit à 2 étapes sera donc confronté au

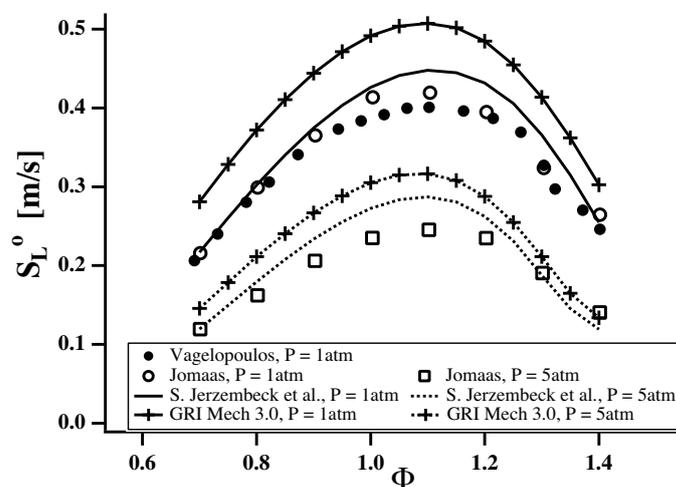


FIG. 5.1 - Vitesse de flamme laminaire d'un mélange propane-air initialement à $T_0 = 298$ K. Comparaison entre les mécanismes complexes (lignes avec ou sans symboles) et des résultats expérimentaux (symboles) pour $P = 1$ atm [159, 69] et $P = 5$ atm [69].

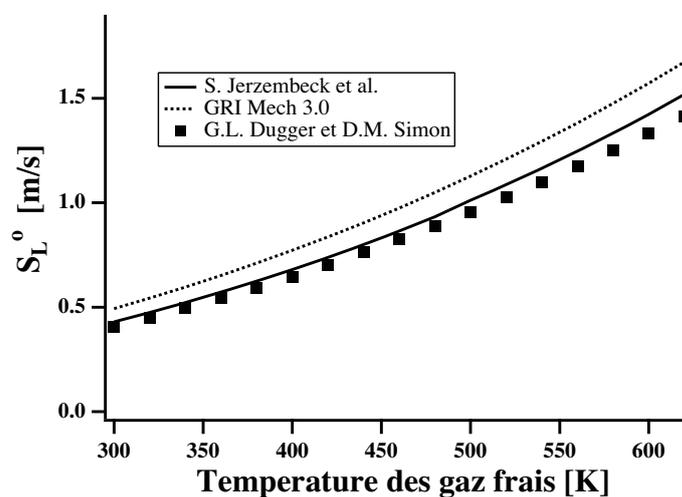


FIG. 5.2 - Effet du préchauffage d'un prémélange propane-air à pression atmosphérique et à la stoechiométrie sur la vitesse de flamme laminaire. Comparaison entre les mécanismes complexes (lignes) [66, 144] et des résultats expérimentaux (symboles) [40].

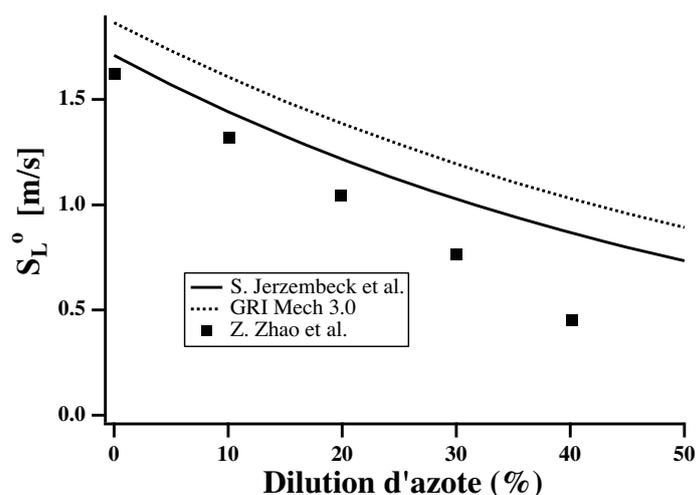
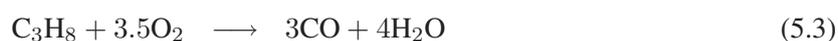


FIG. 5.3 - Effet d'une dilution par N_2 sur la vitesse de flamme laminaire d'un mélange propane-air à pression atmosphérique pour une richesse de 1.1 à 650 K. Comparaison entre les mécanismes complexes (lignes) [66, 144] et des résultats expérimentaux (symboles) [169].

mécanisme de Jerzembeck pour la vitesse et la température adiabatique de flamme, même si il n'a pas pu être validé pour un mélange propane-air sur la plage de pression et de température que l'on rencontre dans un moteur à allumage commandé. Le GRI-Mech 3.0 sera uniquement utilisé comme référence des délais d'allumage puisque des comparaisons avec différentes études expérimentales montrent une bonne prédiction de sa part pour cette grandeur [144].

5.2 Le mécanisme réduit

La cinétique réduite propane-air, dénommée par la suite C3H8-BE2, est basée sur un schéma à deux étapes :



La première réaction est un mécanisme d'oxydation du propane qui contrôle la vitesse de flamme. La seconde réaction est un équilibre CO-CO₂, nécessaire pour correctement prédire la température de flamme adiabatique. Cette cinétique réduite a été construite et validée uniquement pour un mélange propane-air présentant une richesse de 1.

5.2.1 Effet de la pression sur la vitesse de flamme

L'évolution de pression que l'on rencontre dans un moteur à allumage commandé est primordiale dans le développement et la propagation de la flamme. Il est donc important que le schéma cinétique rende compte de cet effet sur la vitesse de flamme. Pour ce faire, on sait que la vitesse de flamme laminaire est liée à la pression par la relation de l'Eq. 5.5 [122].

$$\frac{S_L^0(P)}{S_L^0(P_0)} \propto \left(\frac{P}{P_0}\right)^{\alpha_P}, \quad (5.5)$$

où α_P est directement lié aux exposants du propane et de l'oxygène dans la loi Arrhenius. Pour une cinétique à une étape, cette relation correspond à :

$$\alpha_P = \frac{n_{\text{C}_3\text{H}_8}^F + n_{\text{O}_2}^F}{2} - 1 \quad (5.6)$$

Bien que l'Eq. 5.6 ne soit valable que pour un mécanisme à une étape, cette dépendance en pression a été utilisée pour établir le mécanisme à 2 étapes C3H8-BE2. En se basant sur les résultats expérimentaux de Keck [101], on déduit alors que $\alpha_P = \beta_{\text{Keck}} = -0.17$ soit $n_{\text{C}_3\text{H}_8} + n_{\text{O}_2} = 1.66$.

Respectant la dépendance en pression de la corrélation de Keck pour les exposants des espèces de la réaction 1, le mécanisme à 2 étapes est résumé dans la Tab. 5.1.

n°	Réaction	A [cm ³ /mole.sec]	β	Ea [cal/mole]
1	$\text{C}_3\text{H}_8 + 3.5\text{O}_2 \longrightarrow 3\text{CO} + 4\text{H}_2\text{O}$ Sens direct : $n_{\text{C}_3\text{H}_8}^F = 0.8$ et $n_{\text{O}_2}^F = 0.86$	5.8232E+012	0.000	3.400E+004
2	$\text{CO} + 0.5\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2$ Sens direct : $n_{\text{CO}}^F = 1$ et $n_{\text{O}_2}^F = 0.5$ Sens inverse : $n_{\text{CO}_2}^R = 1$	2.000E+009	0.000	1.200E+004

TAB. 5.1 - Caractéristiques de la cinétique réduite à deux étapes C3H8-BE2.

5.2.2 Validation du mécanisme à 2 étapes sans dilution

Le schéma cinétique C3H8-BE2 a été développé pour réaliser l'allumage et la combustion d'un pré-mélange propane-air à la stoechiométrie dans un milieu où la pression et la température des gaz frais varient fortement (i.e. durant la phase de compression d'un cycle moteur puis de détente). Pour simuler une montée en pression des gaz frais représentative de ce que l'on obtient durant la phase de compression d'un moteur à allumage commandé, les résultats de ce schéma réduit sont comparés au mécanisme détaillé de Jerzembek et à la corrélation de Keck pour une évolution isentropique des gaz frais. Cette dernière

début d'un état de référence représentatif des conditions d'allumage du point $stab_ref$ [$P_0 = 5.44 \text{ bar}$; $T_0 = 723 \text{ K}$].

Vitesse de flamme laminaire

La Fig. 5.4 compare la vitesse de flamme laminaire donnée par le mécanisme réduit à la corrélation donnée par Metghalchi et Keck [101], ainsi qu'au mécanisme détaillé de Jerzembek *et al.* [66]. On remarque que la vitesse donnée par le schéma est très proche de celles obtenues par la corrélation et le mécanisme complexe sur une plage de pression s'étendant de 5 *bars* à 14 *bars*. Au delà de cette pression, la différence s'accroît par rapport au mécanisme complexe jusqu'à atteindre un écart maximum de 12% à une pression de 20 *bar*.

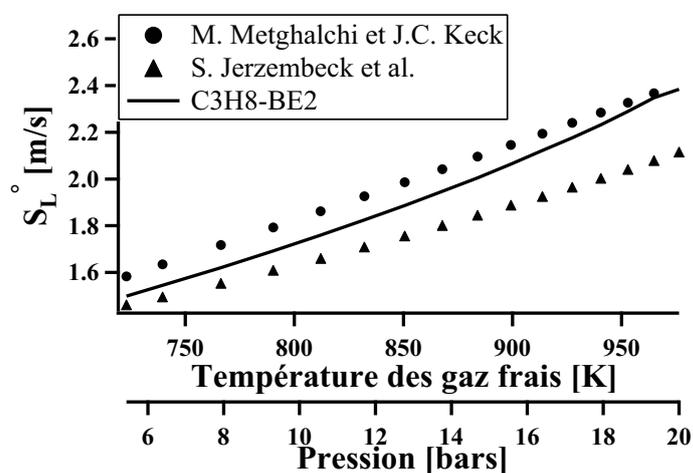


FIG. 5.4 - Vitesses de flammes laminaires prémélangées suivant une évolution isentropique des gaz frais d'un état de référence [$P_0 = 5.44 \text{ bar}$; $T_0 = 723 \text{ K}$].

Température de flamme adiabatique

La température de flamme adiabatique est primordiale pour prédire correctement la pression cylindre pendant la phase de combustion. Cette température ne dépend que du mélange, de sa pression et de sa température initiale. La Fig. 5.5 présente la température de flamme adiabatique pour l'évolution isentropique. Cette température, tracée pour le schéma à 2 étapes et le mécanisme détaillé, est obtenue par un calcul d'équilibre thermo-chimique sous CANTERA.

La Fig. 5.5 montre que pour un mélange à la stoechiométrie, l'évolution de la température adiabatique de flamme est similaire entre le mécanisme détaillé et le schéma à 2 étapes, avec un écart de température inférieur à 2% sur toute l'évolution isentropique.

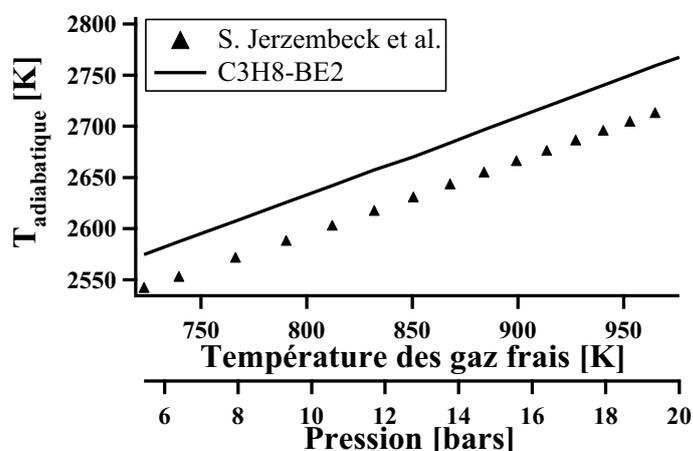


FIG. 5.5 - Température de fin de combustion pour un mélange à la stoechiométrie évoluant de manière isentropique à partir d'un état de référence [$P_0 = 5.44 \text{ bar}$; $T_0 = 723 \text{ K}$].

Épaisseur de flamme laminaire

L'épaisseur thermique δ_L^0 donnée par le schéma 2 étapes C3H8-BE2, définie par l'Eq. 5.7, est cohérente avec les épaisseurs obtenues par le mécanisme de Jerzembek *et al.* comme le montre la Fig. 5.6. On observe que cette épaisseur de flamme diminue fortement avec l'accroissement de la pression et de la température. A une pression et une température [$P = 20 \text{ bar}$; $T = 977 \text{ K}$], l'épaisseur de flamme a diminué de 66% par rapport à celle de l'état de référence [P_0 ; T_0].

$$\delta_L^0 = \frac{T^{GB} - T^{GF}}{\max\left(\left|\frac{\partial T}{\partial x}\right|\right)}, \quad (5.7)$$

avec T^{GB} la température de flamme adiabatique et T^{GF} la température des gaz frais.

Pour décrire la combustion dans un moteur à allumage commandé avec un modèle de flamme épaissie, l'évolution de l'épaisseur en fonction de la pression et de la température doit être connue puisque cette grandeur est une entrée du modèle. Une façon de le faire est de décrire l'épaisseur de flamme par la corrélation de Blint [15] qui donne une bonne approximation de l'épaisseur obtenue par le schéma à 2 étapes comme le montre la Fig. 5.6 (plus de détails sur l'utilisation de la corrélation de Blint par le modèle DTFLES sont donnés en section 5.3).

Délai d'allumage

La figure 5.7 présente les délais d'allumage à pression constante (1 bar ou 5 bar) en fonction de la température initiale du mélange pour la cinétique C3H8-BE2, le schéma complexe GRI-Mech 3.0 et des mesures expérimentales [63]. Le mélange propane-air est à la stoechiométrie. La cinétique réduite

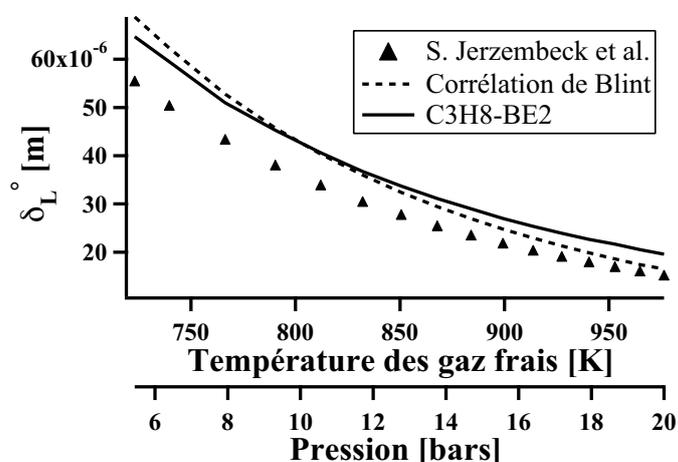


FIG. 5.6 - Epaisseurs thermiques de flammes laminaires à la stoechiométrie suivant une évolution isentropique. Comparaison de la corrélation de Blint [15], du schéma C3H8-BE2 et du mécanisme complexe [66].

C3H8-BE2 s'emballé toujours plus rapidement que la chimie complexe et l'expérience. Cependant, avec un allumage par bougie, la température dépasse toujours les 2000 K ($<1000/T = 0.5$) où les différences de délai d'allumage correspondent respectivement à $5\ \mu\text{s}$ et $1.2\ \mu\text{s}$, pour une pression de $1\ \text{bar}$ et $5\ \text{bar}$. Pour un moteur qui tourne à $1200\ \text{tr}/\text{min}$, ces délais correspondent à moins de 0.05°V , entraînant des conséquences négligeables sur la propagation de la flamme.

5.2.3 Effet de la dilution

Il y a plusieurs raisons pour diluer le mélange combustible dans les moteurs automobiles, mais la principale est une réduction de la température de flamme adiabatique afin de réduire les émissions d'oxydes d'azote (NO_x) comme le montre la Fig. 5.8.

Etant donné que tous les points moteur du banc F7P présentent une dilution par des IGR (pour *Internal Gas Recirculation* en anglais), des comparaisons sur la vitesse de flamme laminaire ainsi que sur la température de flamme adiabatique ont été conduites entre le mécanisme C3H8-BE2 et le mécanisme détaillé de S. Jerzembeck *et al.* [66] pour diverses dilutions d'un prémélange propane-air à la stoechiométrie.

Dans un premier temps, le mécanisme C3H8-BE2 est testé sur une dilution par des gaz brûlés, pour étudier si le mécanisme réduit a un bon comportement à une dilution par IGR. Par la suite, les effets d'une dilution par de l'azote sont également étudiés étant donné que l'un des points de fonctionnement instable du banc moteur F7P est obtenu par dilution des gaz frais par du N_2 (cf. chapitre 10). Il est alors intéressant de quantifier l'erreur sur la vitesse de flamme laminaire commise par le schéma C3H8-BE2 en comparaison au schéma détaillé et à la corrélation de Keck modifiée (Eq. 5.2). Cette comparaison permettra ainsi de voir si il semble raisonnable de conserver le schéma réduit pour la simulation SGE du point instable par dilution de la base SGEmac.

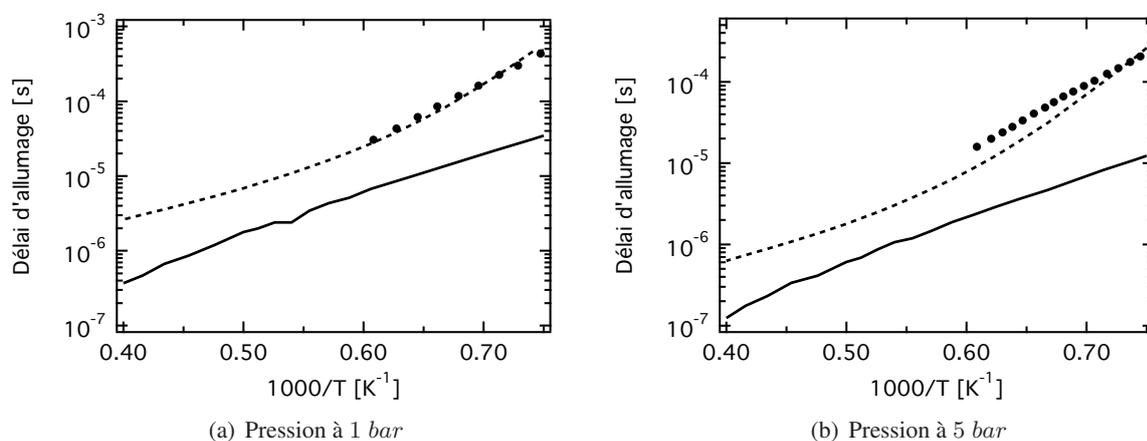


FIG. 5.7 - Evolution du délai d'allumage à pression constante en fonction de la température. C3H8-BE2 : — ; GRI-Mech 3.0 : - - - ; Résultats expérimentaux de Jachimowski [63] : ●.

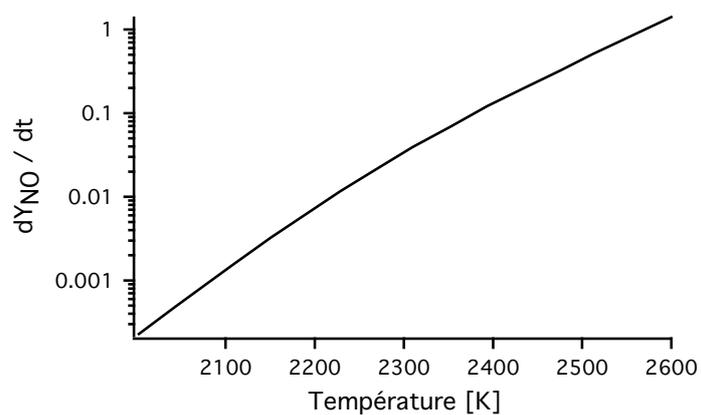


FIG. 5.8 - Taux initial de formation de NO en s⁻¹ en fonction de la température du gaz pour une richesse de 1 et une pression de 15 atm [59].

Dilution par des gaz brûlés

Sur tous les points moteurs IIE réalisés sur la base de données du projet SGEmac, le taux d'IGR issu de l'analyse de combustion ne dépasse pas les 10%. Dans cette partie, un mélange initialement à la stoechiométrie est alors dilué par 10% des produits issus de sa combustion pour simuler une recirculation des gaz brûlés. Les résultats de la comparaison du schéma réduit au mécanisme détaillé de Jerzembeck sont présentés sur les Fig. 5.9 et 5.10. Le calcul est effectué pour un cas proche des fonctionnements moteurs : une compression isentropique des gaz frais.

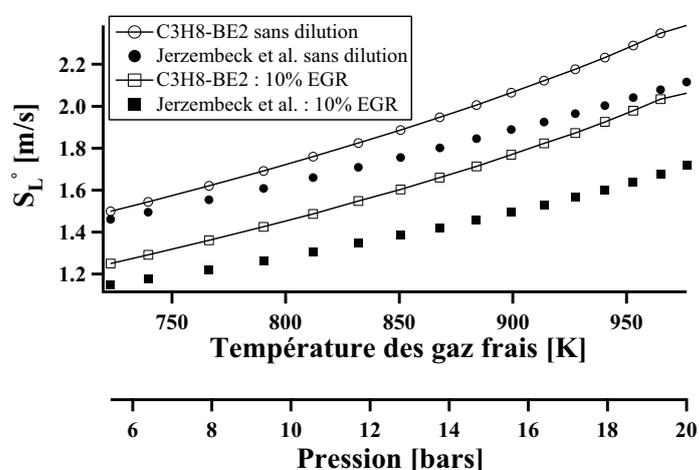


FIG. 5.9 - Evolution de la vitesse de flamme laminaire suivant une évolution isentropique pour une dilution de 10% par des gaz brûlés. Comparaison aux résultats obtenus sans dilution.

Que ce soit pour la chimie simple ou la chimie détaillée, la dilution du mélange par 10% de gaz brûlés entraîne une diminution de la vitesse de flamme de 17% pour les pressions les plus faibles et 13% pour les plus hautes (Fig. 5.9). Avec la dilution, l'écart entre les deux schémas s'accroît. Cependant pour une dilution à 10%, les écarts les plus importants sont de l'ordre de 15%, ce qui reste satisfaisant.

Comme pour la vitesse de flamme, la température de flamme adiabatique, Fig 5.10, diminue dans de plus faibles proportions : avec une dilution de 10% par des gaz brûlés, la diminution de température est de 4.5%. L'écart entre le schéma détaillé et le schéma réduit est toutefois très faible avec une différence constante de 20 K.

Dilution par de l'azote

Le comportement du schéma réduit C3H8-BE2 a été testé sur une dilution par azote dans les conditions du point instable de la base SGEmac :

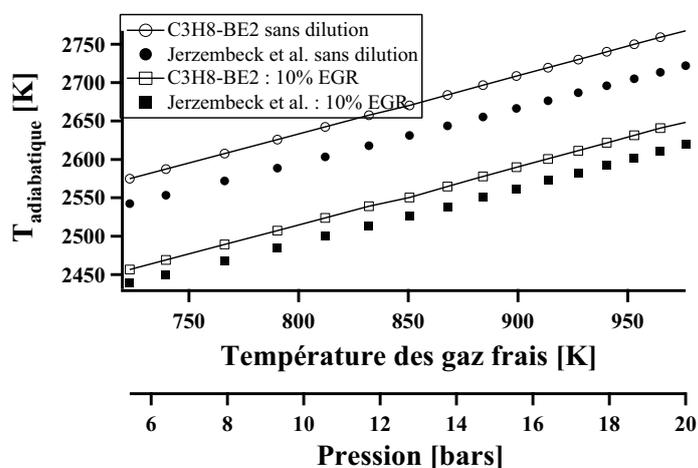


FIG. 5.10 - Evolution de la température de flamme adiabatique suivant une évolution isentropique pour une dilution de 10% par des gaz brûlés. Comparaison aux résultats obtenus sans dilution.

- une dilution des gaz frais par 30% d'azote sans IGR ;
- une compression isentropique ayant pour état de référence les conditions thermodynamiques de l'instant d'allumage, c'est à dire [$T_0 = 550 K$, $P_0 = 2.82 bar$].

Les résultats sont montrés en Fig. 5.11. Les vitesses de flamme données par le schéma C3H8-BE2 surprédisent avec un erreur minimum de 40% celles données par la corrélation de Keck modifiée et par le mécanisme de Jerzembek. Ce schéma réduit est ainsi inadapté pour réaliser la simulation du point instable, et un autre mécanisme réduit C3H8-BE2-DIL, présenté en Tab. 5.2, a été construit. Ce mécanisme est simplement adapté du mécanisme C3H8-BE2 en réajustant la pré-exponentielle de la réaction d'oxydation grâce à l'Eq. 5.8.

$$S_L^0 \propto \sqrt{A} \quad (5.8)$$

On note sur la Fig. 5.11, que le schéma réduit C3H8-BE2-DIL permet d'obtenir les niveaux de vitesse de flamme laminaire prédits par le schéma détaillé et la corrélation de Keck. Similairement au schéma C3H8-BE2, l'erreur de ce schéma réduit croît avec la montée en pression en atteignant une erreur de près de 20% à une pression de 19 bar.

5.3 Utilisation du mécanisme à 2 étapes dans AVBP

Dans cette section, seule la validation du schéma C3H8-BE2 est présentée étant donné que le mécanisme C3H8-BE2-DIL n'est qu'une variante du schéma réduit sans dilution.

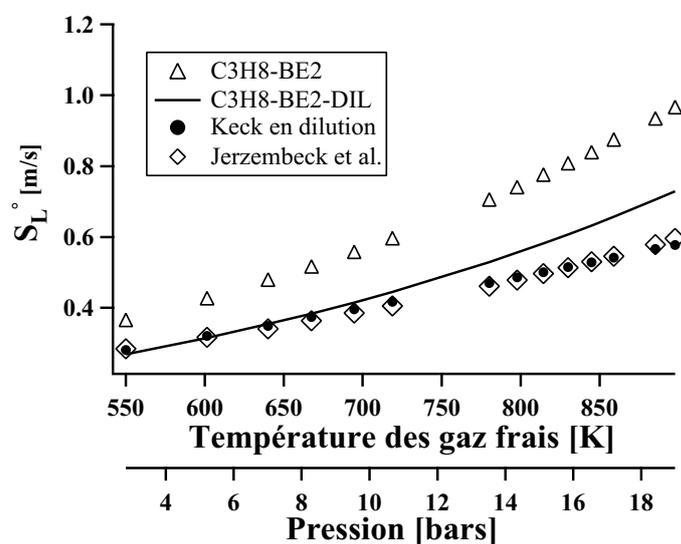


FIG. 5.11 - Evolution de la vitesse de flamme laminaire suivant une évolution isentropique pour une dilution de 30% de N_2 . Comparaison des résultats des cinétiques réduites au mécanisme de Jerzembeck et al. [66] et à la corrélation de Keck corrigée pour la dilution [102].

n°	Réaction	A [cm ³ /mole.sec]	β	Ea [cal/mole]
1	$C_3H_8 + 3.5O_2 \longrightarrow 3CO + 4H_2O$ FORD : $n_{C_3H_8}^F = 0.8$ et $n_{O_2}^F = 0.86$	2.8500E+012	0.000	3.400E+004
2	$CO + 0.5O_2 \rightleftharpoons CO_2$ FORD : $n_{CO}^F = 1$ et $n_{O_2}^F = 0.5$ RORD : $n_{CO_2}^R = 1$	2.000E+009	0.000	1.200E+004

TAB. 5.2 - Caractéristiques de la cinétique réduite à deux étapes C3H8-BE2-DIL. La différence au schéma C3H8-BE2 est surlignée en gras.

Structure de la flamme prémélangée en DNS

Pour valider l'implémentation du mécanisme à 2 étapes C3H8-BE2 dans AVBP, une DNS d'une flamme 1D prémélangée a été réalisée pour une pression de 5.44 *bar* et une température de 723 *K*. La structure de la flamme obtenue est comparée à celle des calculs de flamme 1D réalisés avec CANTERA pour la chimie de S. Jerzembek *et al.* [66] et la chimie réduite C3H8-BE2. La comparaison CANTERA/AVBP permet d'écarter toutes erreurs de codage mais aussi de vérifier l'effet des méthodes numériques et des modèles de transport moléculaire.

En ce qui concerne les propriétés de transport de la DNS sous AVBP, le nombre de Prandtl est fixé à 0.7 et les nombres de Schmidt de chaque espèce ont des valeurs constantes (Tab. 5.3). La viscosité dynamique suit une loi puissance (Eq. 2.30). Tous ces paramètres, déterminés à l'aide des bibliothèques fortran EGLIB [42] et EQUIL [132], seront ceux utilisés par la suite pour réaliser la SGE du banc moteur F7P.

	C ₃ H ₈	O ₂	CO ₂	CO	H ₂ O	N ₂
S_c	1.2583	0.7385	0.9489	0.7487	0.5452	0.7072

TAB. 5.3 - Nombres de Schmidt des espèces utilisées par le mécanisme C3H8-BE2.

Les profils spatiaux des espèces et de la température des différentes flammes laminaires monodimensionnelles sont présentés en Fig. 5.12. On remarque sur cette figure que la structure de flamme obtenue par le mécanisme à 2 étapes est assez proche de celle décrite par le mécanisme complexe. Il est à noter que les niveaux des fractions massiques dans les gaz brûlés diffèrent légèrement, avec un écart maximum de 20% sur le CO. Les autres espèces présentent un meilleur accord avec un écart maximum de 8%.

La comparaison des deux calculs (AVBP / CANTERA) de la cinétique réduite C3H8-BE2 montre d'autre part que la modélisation des propriétés de transport par des valeurs fixes pour le Prandtl et les Schmidt, et par une loi puissance pour la viscosité dynamique, semble suffisante pour bien décrire dans AVBP le mécanisme réduit C3H8-BE2.

Chimie et modèle de flamme épaissie en SGE

Dans la section 3.3.3, il a été montré que pour ne pas affecter le mélange par l'épaississement, ce dernier n'est activé que dans la zone de réaction grâce à un senseur. Ce senseur S se base sur une fonction de présence Ω qui est maximum dans la zone de réaction. Pendant la compression et la détente, afin de bien localiser la position de la flamme, il est important de déterminer de façon dynamique la valeur de $\Omega_0 = \max(\Omega)$ en fonction de la pression et de la température des gaz frais. Une des façons de modéliser Ω_0 est de l'exprimer par une loi puissance (cf. Eq. 5.9) du même type que celle utilisée par Metghalchi et Keck [101] pour la vitesse de flamme.

$$\Omega_0^{fit} = \omega_0 \left(\frac{T}{T_0} \right)^{\alpha_1} \left(\frac{P}{P_0} \right)^{\alpha_2}, \quad (5.9)$$

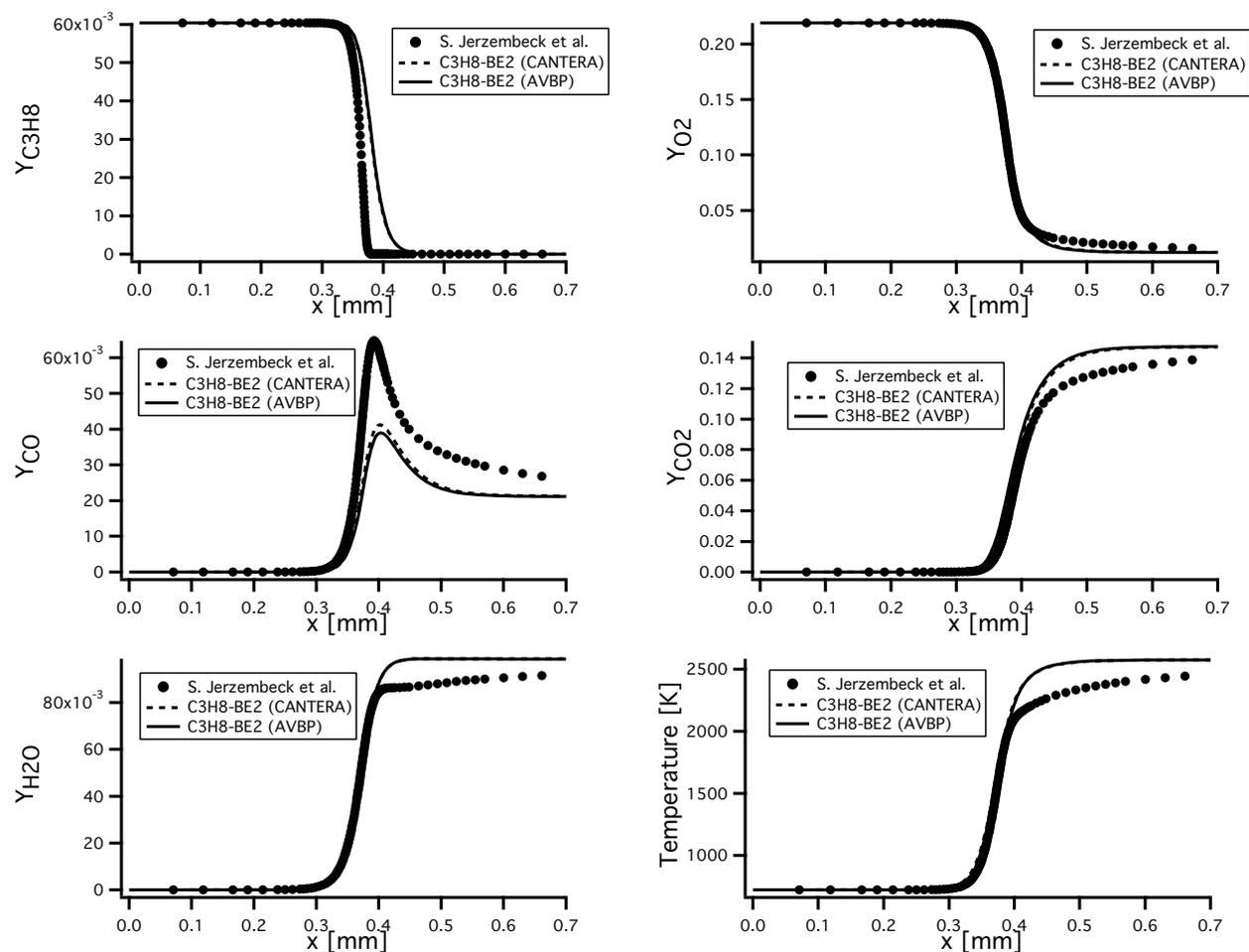


FIG. 5.12 - Evolutions spatiales des fractions massiques et de la température à travers la flamme avec le mécanisme complexe de S. Jerzembeck et al. [66] et le mécanisme simple C3H8-BE2.

avec ω_0 , α_1 et α_2 des constantes à définir.

Dans le cadre de la chimie réduite C3H8-BE2, les taux de réactions nets normalisés montrent sur la Fig. 5.13 que la réaction d'équilibre CO-CO₂ est plus large que la réaction d'oxydation du propane. Ainsi, pour éviter des erreurs numériques dans les gaz brûlés dues à un épaississement insuffisant de la deuxième réaction, la fonction de présence de la flamme se base sur l'équilibre CO-CO₂. Comme le montre la Fig. 5.14, des valeurs de $\omega_0 = 2.26 * 10^{-4}$, $\alpha_1 = 2.13$ et $\alpha_2 = -0.17$ permettent d'avoir un très bon accord entre le maximum de la fonction de présence $\Omega_0^2 = \max(\Omega^2) = \max(Y_{CO}Y_{O_2}^{0.5} \exp(-\Gamma E_a/\mathcal{R}T))$ issu des calculs de flamme 1D sous AVBP et la loi puissance Ω_0^{fit} .

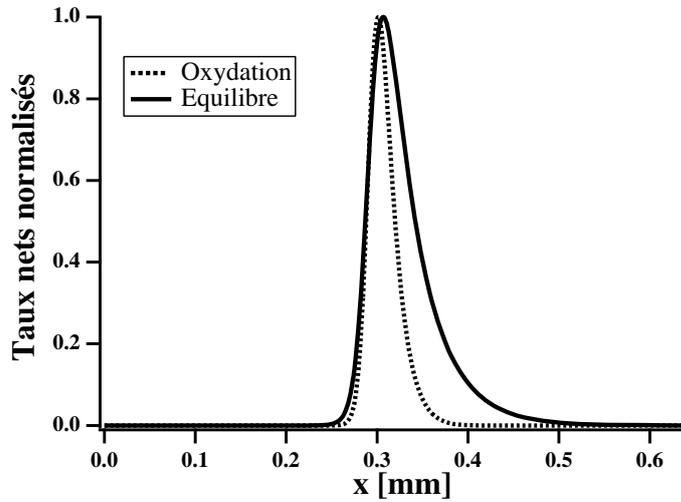


FIG. 5.13 - Taux de réaction dans le sens direct des réactions du schéma C3H8-BE2.

Enfin pour bien résoudre le front de flamme, il faut également connaître son épaisseur suivant la pression et la température des gaz frais. La Fig 5.6 a montré que la corrélation de Blint [15] est une très bonne approximation de l'épaisseur de flamme. Ainsi dans un calcul SGE où la flamme est épaissie d'un facteur F , ce dernier sera défini par l'Eq. 5.10.

$$F = \frac{\Delta x * n}{\delta_L^{Blint}}, \quad (5.10)$$

où Δx est la taille locale du maillage, n le nombre de points choisi pour résoudre la flamme et δ_L^{Blint} l'approximation de l'épaisseur de flamme par la corrélation de Blint définie par l'Eq. 5.11.

$$\delta_L^{Blint} = 2 \left(\frac{T^{GB}}{T^{GF}} \right)^{0.7} \frac{\nu}{Pr S_L^0 \rho^{GF}}, \quad (5.11)$$

où ν est la viscosité cinématique, Pr est le nombre de Prandtl du mélange, S_L^0 la vitesse de flamme laminaire, T^{GB} et T^{GF} sont respectivement les températures des gaz brûlés et des gaz frais, et ρ^{GF} la masse volumique des gaz frais.

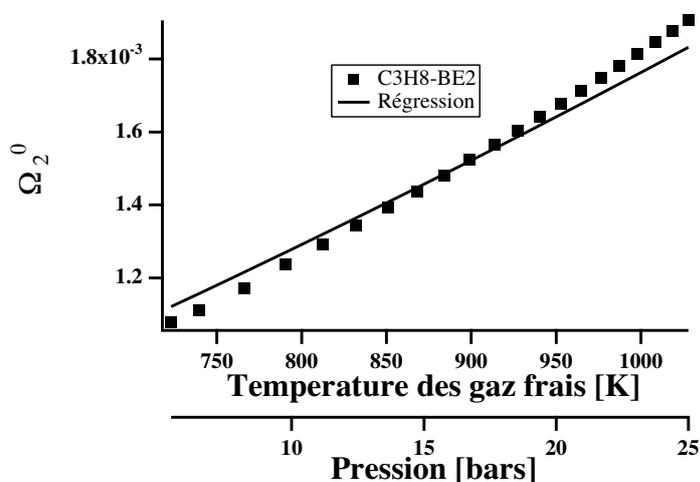


FIG. 5.14 - Fonction de présence de la flamme suivant une évolution isentropique : C3H8-BE2 représente l'évaluation de Ω_0^2 par des calculs de flamme 1D sous AVBP, et la régression modélise la loi puissance Ω_0^{fit} décrite par l'Eq. 5.9.

5.4 Conclusion

Par comparaison avec deux mécanismes détaillés et une corrélation expérimentale, le mécanisme réduit C3H8-BE2 a été construit. Ce mécanisme présente un bon comportement dans ses prédictions de vitesse de flamme laminaire et température adiabatique de flamme pour des plages de pression et température assez larges, représentatives de ce qui est rencontré sur le banc moteur du projet SGEmac. Il a pour premier avantage sa facilité d'implémentation dans AVBP, son faible coût CPU et mémoire, et sa versatilité : il prend en compte les effets de pression, température, mélange et pertes thermiques de façon naturelle. Ce mécanisme est toutefois limité puisque il n'est adapté que pour des mélanges présentant des dilutions par gaz brûlés ou gaz inerte assez faibles (la dilution doit être inférieure à $\sim 10\%$). Pour le point moteur instable par dilution de la base SGEmac (dilution de 30% de N_2), un nouveau schéma réduit C3H8-BE2-DIL basé sur C3H8-BE2 a du alors être réalisé.

L'implémentation de ces schémas réduits dans le code SGE, en particulier l'adéquation des schémas avec les propriétés de transport d'AVBP montre une bonne concordance avec les résultats obtenus sous CANTERA. Enfin il a été montré que le couplage de la chimie réduite et du modèle DTFLES est facilement réalisable grâce à la corrélation de Blint qui permet d'évaluer l'épaisseur de flamme. Le senseur qui permet de détecter la flamme doit également être modifié pour prendre en compte l'évolution de pression et de température rencontrée en moteur à piston.

Afin de réaliser un calcul réactif SGE d'un moteur à allumage commandé, un point de modélisation reste encore à définir : comment initier la cinétique chimique, c'est à dire comment modéliser la bougie ? Cet aspect est l'objet du chapitre suivant qui vise à définir et décrire le modèle d'allumage mimant les effets de la bougie.

Modélisation de l'allumage : le modèle ED (*Energy Deposition*)

La séquence d'allumage d'un mélange réactif est la transition d'un état inerte à haut potentiel chimique à un état de combustion dont les processus physiques sont de nos jours relativement bien compris dans le cadre de configurations académiques. Dans des écoulements laminaires, les influences de l'énergie à la bougie [7, 26, 139, 11, 79], de l'écoulement moyen à la bougie [3, 10], de la cinétique détaillée [74, 142, 140], de la pression [141] ont été largement étudiés. Cependant, dans des écoulements turbulents, les effets convectifs et d'étirement peuvent mener à l'échec de l'allumage [48, 25, 8]. Pour modéliser ces effets, plusieurs modèles développés en RANS [93, 118, 19, 76] sont présents dans la littérature. La difficulté s'accroît en SGE étant donné que la plupart de la physique d'une phase d'allumage prend place à une échelle spatiale très petite ce qui augmente considérablement le coût de la simulation. De plus, l'allumage doit rendre compte de phénomènes qui ne sont pas pris en compte dans des codes de mécanique des fluides comme de très hautes températures, une phase de plasma et des transferts radiatifs. C'est pourquoi, l'étude de séquences d'allumage par SGE est un sujet relativement récent dans la littérature (allumage d'un jet partiellement prémélangé [82] ou un bluff-body annulaire [152, 158]).

Dans le cadre des moteurs à piston, la modélisation de l'allumage est primordiale puisque son timing conditionne la pression cylindre et il est une source potentielle de VCC. Deux principales approches sont alors utilisées pour modéliser l'allumage :

- le dépôt d'un noyau de gaz brûlés : dans cette approche, la croissance du noyau dans les premiers temps après allumage est calculée par un modèle annexe 0D ou 1D. Ce noyau est ensuite injecté dans le domaine de calcul quand il a atteint une taille suffisamment grande pour être résolu sur le maillage. Le modèle de combustion peut alors prendre le relais. Pour exemple, les SGE basées sur des modèles à densité de surface de flamme peuvent être initialisées par ce type de dépôt en spécifiant un volume de gaz brûlés après allumage [118, 126, 160].
- Le dépôt d'énergie : cette méthode consiste à réaliser l'allumage complet dans le domaine de calcul en déposant une certaine quantité d'énergie à la position de la bougie, en utilisant une chimie sensible à la température et aux espèces, et en laissant la flamme s'allumer de par elle-même. Ainsi,

dans cette approche, la croissance du noyau est calculée explicitement dans le domaine de calcul SGE dès le dépôt d'énergie [155].

Dans chacun de ces modèles deux niveaux de modélisation sont à distinguer : l'aspect thermodynamique qui est essentiel, et la modélisation du système électrique (type modèle AKTIM [38]) pas toujours pris en compte. Dans cette thèse, le modèle de dépôt d'énergie utilisé prend en compte seulement l'aspect thermodynamique. Dans ce modèle le taux de réaction chimique est 3D dès le dépôt et des changements locaux de vitesses influencent le noyau de flamme dès l'imitation du claquage de la bougie par dépôt d'énergie. Cette modélisation 3D des premiers instants est la principale difficulté dans l'utilisation de cette méthode dans une SGE puisque les forts gradients de température après dépôt doivent être résolus, menant à des tailles de cellule et des pas de temps très petits.

Ce chapitre est organisé comme suit : la section 6.1 rappelle les principales phases d'un allumage par bougie. La section 6.2 explique comment le modèle de dépôt d'énergie imite un allumage par bougie et présente les équations du dépôt d'énergie. Les sections suivantes montrent la validation de ce modèle, validation qui a été menée conjointement avec G. Lacaze [81]. La section 6.3 montre tout d'abord le comportement du modèle dans des cas très résolus de DNS d'écoulement parfaitement prémélangé : (1) un allumage 1D (section 6.3.1) et (2) un allumage laminaire sphérique 3D (section 6.3.2). L'extension à des situations plus proches de celles rencontrées en SGE de moteur à allumage commandé avec un maillage plus grossier est présentée en section 6.4. La façon dont le modèle de dépôt d'énergie est couplé à celui de flamme épaissie est tout d'abord présentée, et les allumages monodimensionnel et tridimensionnel (section 6.3) sont répétés sur des maillages moins fins.

6.1 Physique d'un allumage par bougie

Le principe général d'un allumage par bougie est le suivant : une haute tension électrique ($\sim 30 \text{ kV}$) appliquée entre deux électrodes induit la création d'un plasma à très haute température ($\sim 60\,000 \text{ K}$) contenant assez d'énergie pour allumer un mélange réactif. Ce plasma a été étudié en détail par Maly et Vogel en 1978 [94] qui ont proposé une description détaillée de la formation de ce dernier ainsi que des processus qui interviennent pendant l'allumage. Quatre phases principales ont été identifiées :

- La phase de pré-claquage (*pre-breakdown phase* en anglais) et la phase de claquage (*breakdown phase*) : pendant ces deux phases le gaz présent entre les électrodes devient conducteur par un processus d'ionisation. Les électrons libres qui sont présents en très basse concentration dans le gaz sont accélérés vers l'anode par le champ électrique. Sur leur chemin, ils entrent en collision avec des molécules inertes qui libèrent des électrons sous la violence des chocs. Les nouveaux électrons sont alors accélérés et entrent à leur tour en collision [88]. Le nombre de collision augmente ainsi de façon exponentielle diminuant la résistance du gaz et le rendant de plus en plus conducteur, ce qui a pour effet d'augmenter l'intensité du courant entre électrodes. Par ce processus de cascade électronique, un canal conducteur relie l'anode à la cathode ;
- La phase d'arc (*arc phase* en anglais) : l'augmentation du courant décharge la capacité de la bougie et entraîne une forte chute de la tension qui caractérise le début de la phase d'arc. A cet instant la conductivité atteinte par le plasma est maximale et sa température est aux alentours de $40\,000$ à $60\,000 \text{ K}$. Pendant la phase d'arc, l'intensité du courant ainsi que la tension diminuent. Ils at-

teignent respectivement des valeurs de l'ordre de $\approx 100 \text{ mA}$ et $\approx 50 \text{ V}$. Le plasma se refroidit jusqu'à atteindre une température de 8000 K et son volume augmente. La présence de radicaux et de hautes températures dans la proximité du plasma induit l'emballement des réactions chimiques.

- La phase de décharge lumineuse (*glow phase* en anglais) : pendant cette dernière phase, la température du gaz à la bougie est d'environ 3000 K . C'est pendant cette phase d'une durée approximative de 1 ms que la plupart de l'énergie est transférée au gaz.

La Tab. 6.1 résume le bilan d'énergie d'un allumage par bougie présenté dans l'étude de Maly [94].

	Phases de claquage	Phase d'arc	Phase de décharge
Pourcentage de l'énergie totale	3%	3%	94%
Pertes radiatives	< 1%	$\approx 5\%$	< 1%
Pertes par conduction (aux électrodes)	$\approx 5\%$	$\approx 45\%$	$\approx 70\%$
Energie disponible pour l'allumage	$\approx 3\%$	$\approx 1.5\%$	$\approx 28\%$

TAB. 6.1 - Bilan d'énergie pour un allumage par bougie [94].

L'estimation montre que l'énergie transmise au mélange est d'environ 30% et que la plupart de l'énergie est perdue par conduction aux électrodes. Des études plus récentes ont établi que l'onde de pression générée par l'expansion soudaine du plasma est également responsable d'une part non négligeable des pertes d'énergie. Ainsi l'énergie transmise au mélange serait plus près de 10% que de 30% [154]. On notera les gammes d'incertitude sur l'énergie véritablement retrouvée dans le gaz.

6.2 Description du modèle de dépôt d'énergie

L'allumage dans AVBP est mimé par un dépôt d'énergie (modèle ED pour *Energy Deposition* en anglais) [155]. Cependant, le code ne permet pas de simuler la phase de plasma. Le modèle par dépôt d'énergie s'attache seulement à reproduire les effets de la phase de décharge lumineuse d'un allumage par bougie où la température du gaz est relativement basse. L'énergie injectée par le modèle n'est que l'énergie transmise au mélange comme spécifiée dans la section précédente. Il est également nécessaire pour ce modèle de spécifier la durée du dépôt, qui correspond à celle du dépôt réel, ainsi que sa taille. En première approximation, la taille du dépôt est égale à l'écart entre électrodes.

Le modèle de dépôt d'énergie consiste alors simplement à l'ajout d'un terme source volumique \dot{Q} (W/m^3) dans l'équation d'énergie :

$$\rho \frac{DE}{Dt} = \dot{\omega}_T + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho \sum_{k=1}^N h_{s,k} Y_k V_i^k \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\sigma_{ij} u_i) + \dot{Q} \quad (6.1)$$

Le choix a été fait de décrire \dot{Q} par une distribution gaussienne en espace et en temps (Tab. 6.2), choix également pris dans l'étude de Subramanian *et al.* [152].

Dimension	Expression
1D	$\dot{Q}(x, t) = \frac{\varepsilon_i}{2\pi\sigma_s\sigma_t\Delta y} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-x_0}{\sigma_s}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2}$
3D	$\dot{Q}(x, y, z, t) = \frac{\varepsilon_i}{4\pi^2\sigma_s^3\sigma_t} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{r}{\sigma_s}\right)^2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{t-t_0}{\sigma_t}\right)^2}$ avec $r = ((x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2)^{1/2}$

TAB. 6.2 - Expression et forme de la densité de puissance \dot{Q} utilisée pour le dépôt d'énergie suivant la dimension du problème.

ε_i représente l'énergie déposée dans le gaz après déduction des diverses pertes (unité : $J.m^{-1}$ en 1D puisque les maillages sont en réalité 2D avec une cellule en transverse de largeur Δy , et J pour le 3D). $\sigma_s = \frac{\Delta_s}{2\sqrt{\ln(10^4)}}$ et $\sigma_t = \frac{\Delta_t}{2\sqrt{\ln(10^4)}}$ contrôlent la taille et la durée du dépôt, où Δ_s est la taille du dépôt et Δ_t sa durée. (x_0, y_0, z_0) sont les coordonnées du centre du dépôt (généralement le point médian entre électrodes).

6.3 Tests de validation en DNS

6.3.1 Le modèle d'allumage ED en 1D

Description du cas test

Ce cas test 1D, dont le domaine de calcul est représenté sur la Fig. 6.1, permet d'étudier le comportement spatial et temporel du modèle d'allumage. Le terme source d'allumage correspond à l'expression 1D de la Tab. 6.2.

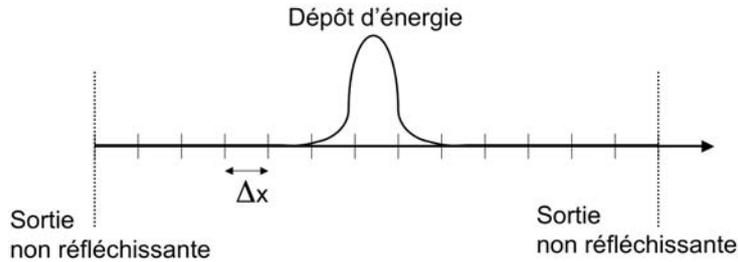


FIG. 6.1 - Schéma du maillage mono-dimensionnel utilisé.

Avant allumage, le calcul est initialisé avec un mélange propane-air à la stoechiométrie ayant une température initiale de 300 K et une pression de 1 bar . La chimie est modélisée par le schéma cinétique réduit C3H8-BE2 (sans dilution) présenté au chapitre 5.

Pour ces conditions thermodynamiques, l'épaisseur de flamme laminaire est égale à 0.33 mm . La taille caractéristique des cellules étant $\Delta x = 0.033 \text{ mm}$, la flamme est ainsi résolue sur 10 cellules ce qui est suffisant pour considérer ce calcul comme une DNS. Les paramètres du modèle de dépôt d'énergie sont présentés en Tab. 6.3 :

Δ_s	2.5 mm
Δ_t	$50 \mu s$
ε_i	0.25 J/m

TAB. 6.3 - Paramètres d'allumage du cas 1D DNS.

Résultats

Le calcul montre sur la Fig 6.2 que l'allumage peut se décomposer en 3 phases :

- une augmentation locale de la température pendant le dépôt d'énergie (Fig. 6.2(a)) ;
- un emballement chimique et une initiation du noyau de flamme (Fig. 6.2(b) and 6.2(c)) ;
- une propagation de la flamme (Fig. 6.2(d)).

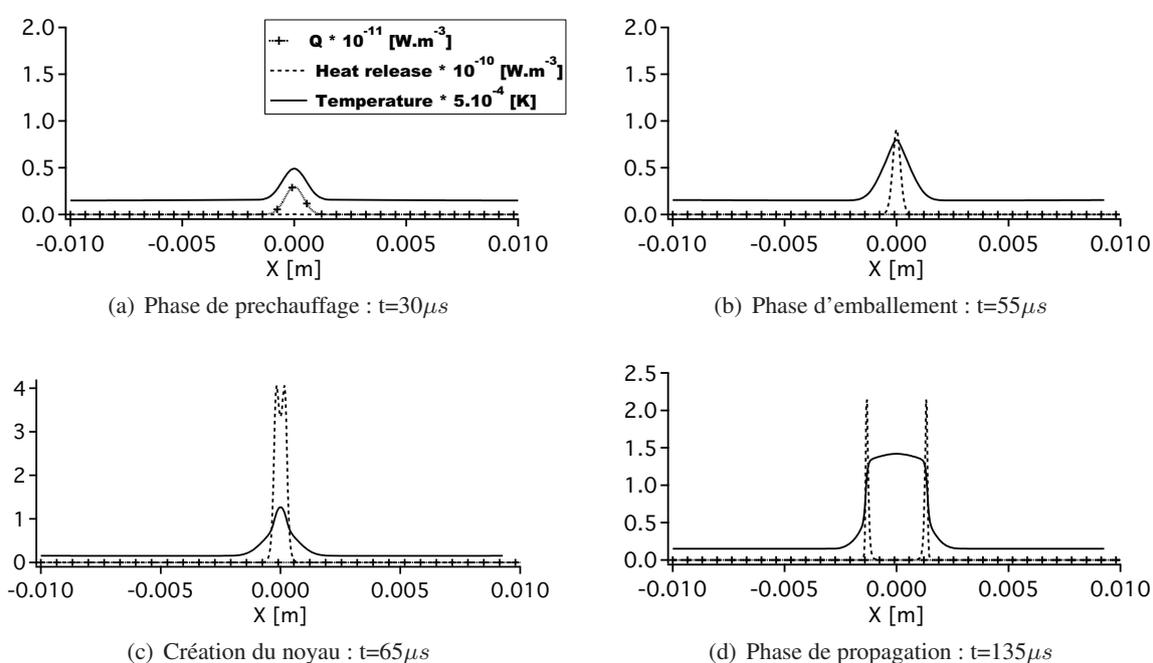


FIG. 6.2 - Profils spatiaux de température, du dégagement de chaleur (Heat release) et de la densité de puissance de la bougie (\dot{Q}) à quatre temps caractéristiques de l'allumage.

Quand l'énergie est déposée, la température augmente localement jusqu'à 1400 K (Fig. 6.3). Après un temps d'induction, la réaction d'oxydation du propane commence et crée du CO qui emballe l'équilibre CO – CO₂. Il s'en suit la création d'un noyau de flamme à haute température et la propagation de la flamme.

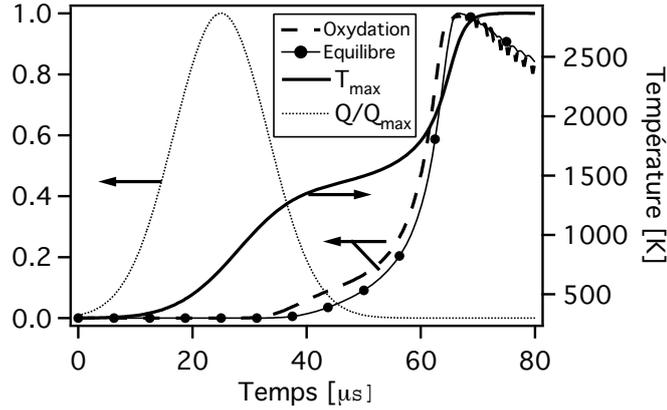


FIG. 6.3 - Evolutions temporelles de la densité de puissance de la bougie, de la température maximum du domaine et des taux de réactions nets normalisés.

Sur la Fig. 6.4, on observe que, pendant l'emballement chimique, la vitesse de consommation S_c (Eq. 6.2) est jusqu'à 10 fois supérieure à la vitesse de flamme laminaire. Ce phénomène est lié à une température du noyau de flamme bien supérieure à la température de flamme adiabatique (phénomène de sur-adiabaticité). Puis, 400 µs après allumage, la vitesse de consommation se stabilise en atteignant la vitesse de flamme laminaire.

$$S_c = \frac{1}{2\rho^{GF}Y_{C_3H_8}^{GF}} \int_{-\infty}^{+\infty} |\dot{\omega}_{C_3H_8}| dx \quad (6.2)$$

Dans l'Eq. 6.2, la vitesse de consommation est basée sur le taux de consommation du propane : $\dot{\omega}_{C_3H_8}$, ρ^{GF} and $Y_{C_3H_8}^{GF}$ sont respectivement la densité et la fraction massique du propane dans les gaz frais. Le facteur 1/2 permet de prendre en compte les deux fronts de flamme qui se propagent dans le domaine 1D. Un des avantages du modèle ED est de capturer naturellement la sur-adiabaticité de la flamme puisque la chimie y est explicitement résolue. De même, si il est nécessaire d'ajouter les effets des pertes par rayonnement ou de la convection à la bougie, le modèle n'a pas à être modifié. Par contre toutes ces propriétés ont un coût : il faut que la zone d'allumage soit maillée assez finement pour résoudre le front de flamme.

6.3.2 Le modèle d'allumage ED en DNS

Cette partie est consacrée à la validation du modèle de dépôt d'énergie sur un allumage laminaire 3D, situation typiquement rencontrée dans les moteurs à allumage commandé. En effet, dans les prémices

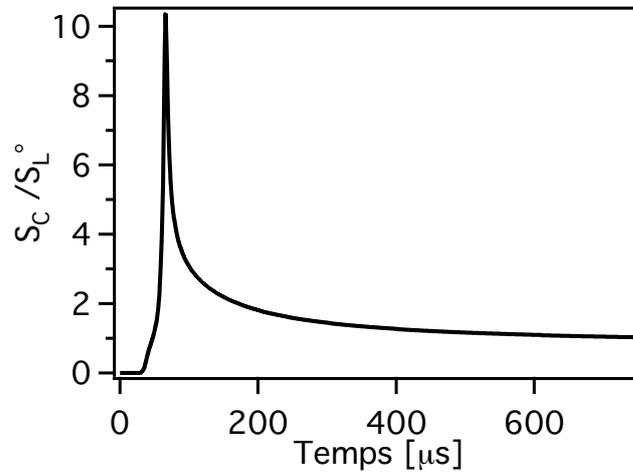


FIG. 6.4 - Vitesse de consommation S_c comparée à la vitesse de flamme laminaire S_L^0 après dépôt d'énergie.

de l'allumage, l'écoulement est laminaire autour de la flamme à cause de l'onde de choc générée par l'allumage. L'évolution initiale de la flamme est alors globalement sphérique. Ce test permet également de mettre en évidence les effets de courbures et d'étirement sur l'évolution de la flamme.

Description du cas 3D

Ce test consiste à simuler la configuration de l'ARC du CORIA (Fig. 6.5(a)) étudiée expérimentalement par Renou [124]. Elle permet l'allumage d'un prémélange propane-air à la stoechiométrie sur lequel l'expansion d'une flamme laminaire sphérique allumée par bougie a été caractérisée. L'arrivée d'air et du propane est générée par un ventilateur résultant en une vitesse moyenne de l'écoulement de 4 m/s . Ce mélange est ensuite tranquilisé dans des cadres en nid d'abeilles et son homogénéisation a été préalablement favorisée par un passage dans un lit de billes de verre de 8 mm . L'écoulement en arrivée de la chambre de combustion se trouve alors parfaitement prémélangé et se place dans un régime laminaire. Des grilles génératrices de turbulence homogène isotrope peuvent être placées en fin de chambre de tranquillisation suivant le régime de l'écoulement que l'on souhaite obtenir. Dans ce travail, seulement le régime laminaire a été simulé. Pour la simulation numérique, la propagation de la flamme étant sphérique, le domaine de calcul a été réduit à un huitième de sphère (Fig. 6.5(b)). Le rayon de cette sphère est égal à 12.0 mm et la taille caractéristique des cellules dans la zone de propagation de la flamme correspond à 0.05 mm . Le maillage comprend alors 2 500 000 cellules. Pour les conditions limites, trois faces comportent donc des conditions de symétrie tandis que la dernière est modélisée comme une condition de sortie caractéristique non réfléchissante en pression (voir Tab. 6.4).

Le calcul est initialisé avec un mélange au repos à température et pression atmosphérique ($P_0 = 10^5 \text{ Pa}$ and $T_0 = 300 \text{ K}$). Dans cette chambre, l'allumage est initié par des électrodes de 0.3 mm de diamètre dont l'écartement cathode/anode est de 2 mm . Renou [124] estime qu'environ 2.5 mJ de l'énergie totale fournie aux électrodes est déposée dans le fluide. Les paramètres utilisés pour le modèle

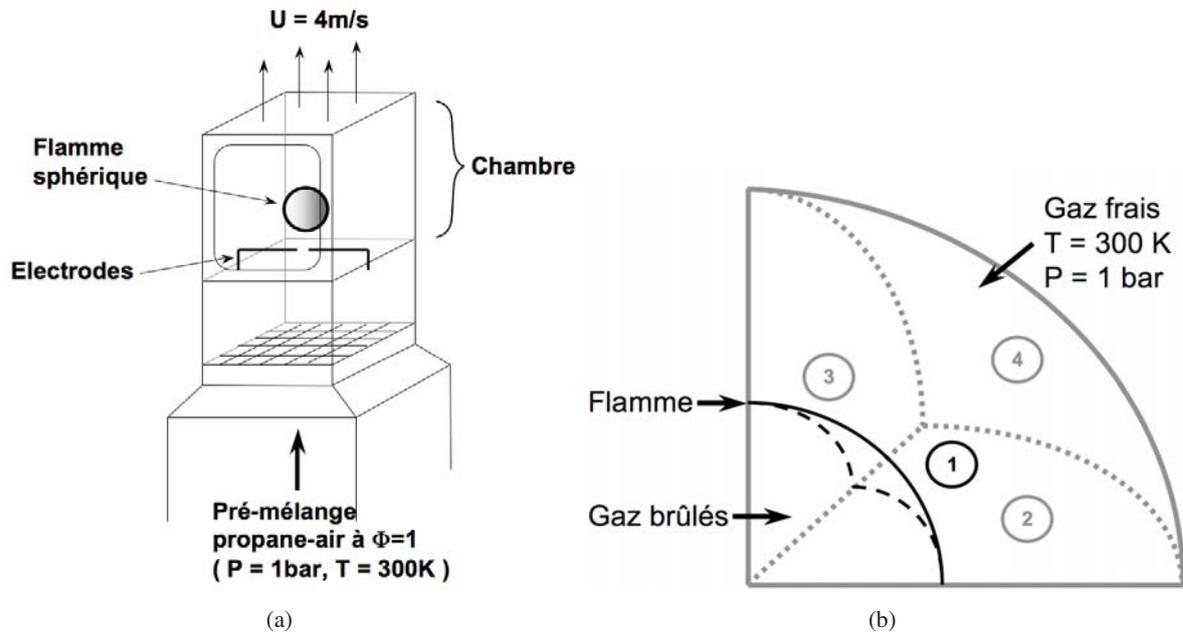


FIG. 6.5 - (a) Schéma du banc expérimental utilisé par Renou [124], (b) Domaine de simulation.

Frontières	Quantités imposées	Coefficient de relaxation
1	SYMMETRY	-
2	SYMMETRY	-
3	SYMMETRY	-
4	$P = 10^5\text{ Pa}$	$K_P = 0$

TAB. 6.4 - Conditions limites.

d'allumage sont résumés dans la Tab. 6.5.

	Expérience	Simulation
Δ_{spark} [mm]	2 (distance entre électrodes)	2
ε_i [mJ]	2.5	2.5
Δ_t [μ s]	120	120

TAB. 6.5 - Paramètres d'allumage de l'expérience et de la simulation.

Pour simuler cet allumage 3D, le schéma C3H8-BE2 n'a pu être utilisé car il n'a pas été développé pour donner la bonne vitesse de flamme laminaire à pression et température atmosphérique. Un mécanisme à 2 étapes donnant une vitesse de flamme laminaire plane S_L de 37 cm.s^{-1} a alors été conçu (voir Tab 6.6). Cette valeur, déterminée pour un prémélange à la stoechiométrie à des conditions thermodynamiques atmosphériques, est cohérente avec les données que l'on peut trouver dans la littérature [101, 114, 136] comme le montre la figure 6.6. Ce schéma a été associé aux nombres de Schmidt de la Tab. 5.3.

n°	Réaction	A [cm ³ /mole.sec]	β	Ea [cal/mole]
1	$\text{C}_3\text{H}_8 + 3.5\text{O}_2 \longrightarrow 3\text{CO} + 4\text{H}_2\text{O}$ Sens direct : $n_{\text{C}_3\text{H}_8}^F = 0.9028$ et $n_{\text{O}_2}^F = 0.6855$	9.7100E+011	0.000	3.300E+004
2	$\text{CO} + 0.5\text{O}_2 \rightleftharpoons \text{CO}_2$ Sens direct : $n_{\text{CO}}^F = 1$ et $n_{\text{O}_2}^F = 0.5$ Sens inverse : $n_{\text{CO}_2}^R = 1$	4.5100E+010	0.000	1.200E+004

TAB. 6.6 - Paramètres du schéma cinétique à 2 étapes utilisé pour l'allumage 3D à pression atmosphérique.

Résultats

L'intérêt de ce cas test est d'évaluer si le modèle de dépôt d'énergie associée à une chimie simple est capable de reproduire, dans le cas d'un écoulement laminaire, des grandeurs tels que la croissance du noyau, la vitesse de flamme et l'étirement. Il ne s'agit pas d'un cas trivial car seule la vitesse de flamme non étirée est garantie par le schéma. Tous les autres mécanismes contrôlant l'allumage (dépôt, effet de l'étirement, sur-adiabaticité, courbure, diffusion différentielle) doivent être prévus par le calcul.

Croissance du noyau de flamme

Une comparaison de l'évolution temporelle du rayon de la flamme entre les résultats expérimentaux et les résultats numériques est montrée en Fig. 6.7(a). Le rayon de flamme est déterminé grâce à la fraction massique de propane : $R = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{\frac{1}{3}} V_T \left(1 - \frac{Y_F^{moy}}{Y_F^{GF}}\right)^{\frac{1}{3}}$ où V_T est le volume du domaine de calcul, Y_F^{mean} est la fraction massique moyenne de propane, et Y_F^{GF} est la fraction massique de propane dans les gaz frais.

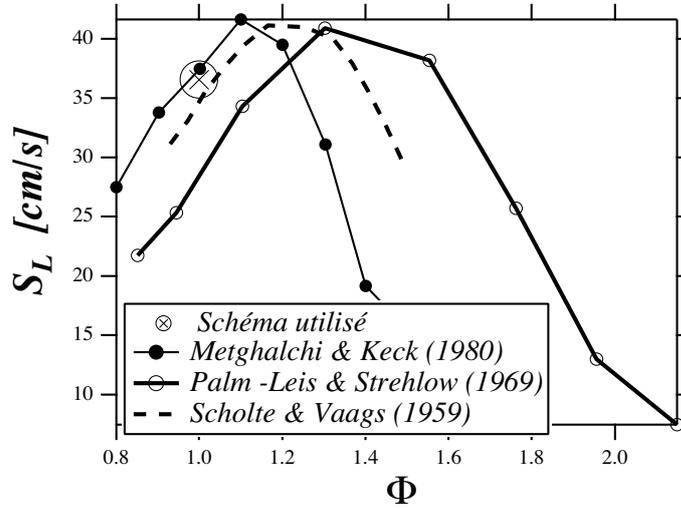


FIG. 6.6 - Vitesses de flamme laminaires en fonction de la richesse du mélange : les valeurs expérimentales de la littérature sont représentées par des traits et la valeur donnée par le mécanisme réduit du calcul est un symbole.

On observe qu'il y a un bon accord entre les résultats numériques et l'expérience pour la croissance initiale du noyau induite par le dépôt d'énergie. Même si la valeur numérique est légèrement supérieure, il est intéressant de noter que la croissance de la flamme se fait de manière identique à celle de l'expérience avec les mêmes changements de pente.

Vitesse de flamme

La vitesse de flamme est tracée en fonction du temps sur la Fig. 6.7(b). Cette vitesse correspond à la vitesse de consommation S_c basée sur le taux de réaction. Elle est définie par l'Eq. 6.3.

$$S_c = \frac{1}{\rho^{GF} Y_F^{GF}} \int_{-\infty}^{+\infty} |\omega_F| dn \quad (6.3)$$

Il n'est pas possible expérimentalement de mesurer S_c par l'Eq. 6.3. Par contre, on montre que pour une flamme sphérique, S_c peut être déduite du rayon de la flamme $R(t)$ par l'Eq. 6.4 [122].

$$S_c = \frac{\rho^b}{\rho^u} \frac{dR}{dt} \quad (6.4)$$

La Fig. 6.7(b) compare les valeurs de S_c obtenues par l'Eq. 6.3 dans AVBP et par l'Eq. 6.4 expérimentalement. On constate un bon accord entre les deux résultats. De plus, comme attendu pour une flamme aussi étirée, S_c n'est pas égal à S_L la vitesse de flamme plane (37 cm/s) : l'étirement fait baisser la vitesse à environ 20 cm/s pendant cette phase initiale. Le modèle ED couplé à une résolution explicite de la chimie capte très bien cet effet de l'étirement.

Taux d'étirement de la flamme

L'étirement de la flamme, K , est tracé en fonction du temps sur la Fig. 6.7(c). L'expression de K pour

une flamme prémélangée laminaire sphérique se propageant à pression constante est donnée par l'Eq. 6.5.

$$K = \frac{1}{A_L} \frac{dA_L}{dt} = \frac{2}{R} \frac{dR}{dt} \quad (6.5)$$

La figure 6.7(c) montre que l'étirement est très fort pendant l'initiation de la flamme ($t < 0.5 \text{ ms}$). Ensuite il devient assez faible et la vitesse de la flamme tend vers la vitesse de flamme plane. Quand l'étirement devient nul, la flamme atteint la vitesse de flamme laminaire. Cet instant n'est pas montré sur la Fig. 6.7(b) car la flamme atteint les bords du domaine de calcul auparavant.

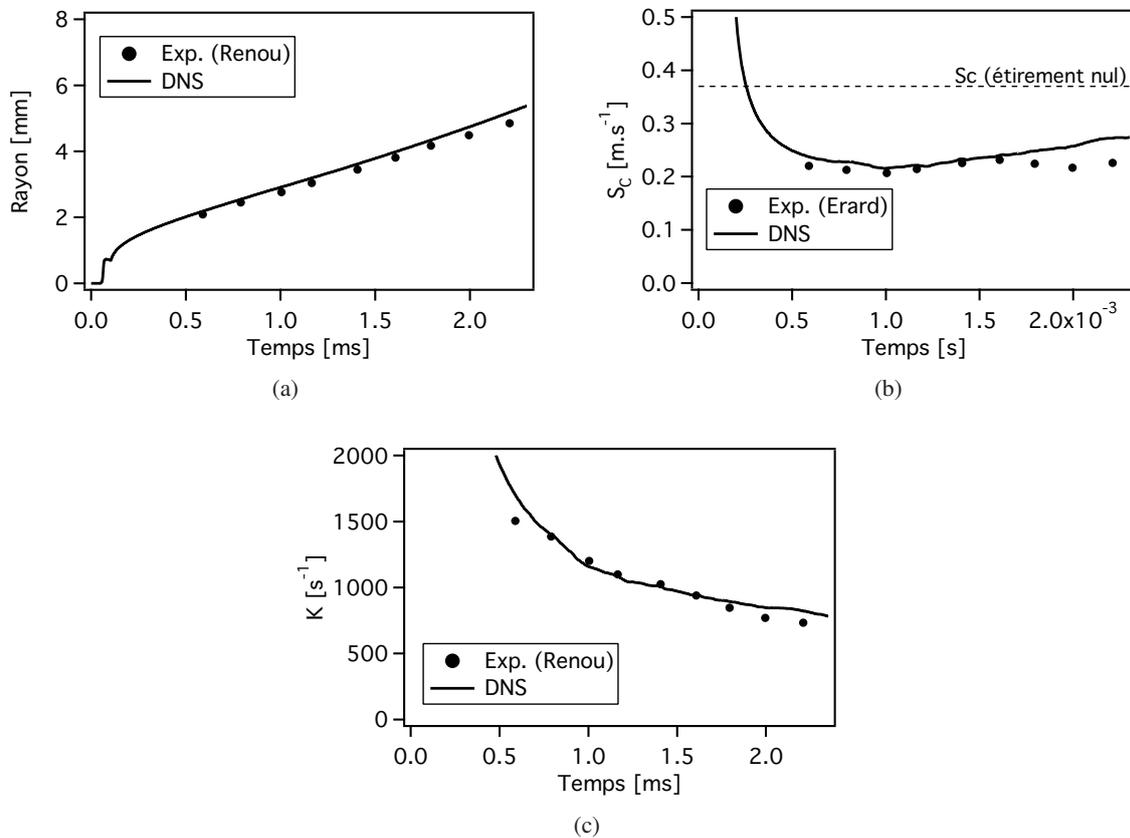


FIG. 6.7 - (a) Rayon de flamme en fonction du temps. (b) Vitesse de consommation en fonction du temps. (c) Etirement en fonction du temps.

Le modèle d'allumage montre ainsi par ces deux cas tests DNS un bon comportement. Cependant en SGE, un niveau de couplage supplémentaire est requis avec le modèle de flamme épaissie ce qui fait l'objet de la section suivante.

6.4 Le modèle d'allumage ED en SGE

6.4.1 Couplage du modèle de combustion avec le modèle ED

La taille caractéristique de cellule en SGE réactive est largement supérieure à l'épaisseur de flamme. Un moyen de résoudre la flamme est d'épaissir le front de flamme (cf. section 3.3). Cette procédure employée avec TFLES augmente localement la diffusion et pose un problème de couplage avec le modèle ED : en utilisant le modèle ED tel que décrit précédemment, l'allumage échoue généralement car la chaleur du dépôt est diffusée avant même que les réactions ne s'emballent.

Un moyen direct de rendre compatible le modèle ED et le modèle TFLES est de bloquer l'épaississement dans les premiers temps après le dépôt d'énergie ($F = 1$) et de le déclencher seulement lorsque les réactions chimiques s'emballent, c'est à dire quand la première flamme est créée. La méthode choisie a été de déclencher l'épaississement quand la température dans le dépôt atteint une température critique T_c égale à 90% de la température de flamme adiabatique. L'épaississement modifié s'écrit alors :

$$F^*(x, t) = F(x, t) \cdot \frac{1}{2} \left(1 + \tanh \left(\frac{T_{\max} - T_c}{\Delta T} \right) \right), \quad (6.6)$$

où T_{\max} est la température maximum dans le domaine de calcul, T_c la température critique et ΔT la largeur de la zone de transition (fixée à 30 K).

Pour illustrer ce couplage, l'allumage mono-dimensionnel, réalisé en section 6.3.1, a été répété sur un maillage plus grossier où $\delta_L^0/\Delta x = 1$. Le dépôt d'énergie (Tab. 6.3) est exactement le même pour les deux simulations. La Figure 6.8 présente l'évolution temporelle de la température maximum dans le domaine et la valeur maximum du facteur d'épaississement.

Comme attendu, l'épaississement n'est déclenché qu'après $t = 50 \mu s$, quand la température atteint la température critique prise égale ici à 1800 K. La phase de préchauffage n'est pratiquement pas affectée en ayant la même durée que dans la DNS. On remarque cependant que la simulation avec la flamme épaissie atteint une température plus élevée pendant le dépôt, probablement due à une résolution limite du dépôt d'énergie avec 8 points. La différence la plus notable entre la SGE et la DNS intervient au déclenchement de l'épaississement avec un infléchissement de la température maximum plus accentué que celui observé en DNS. Ce dernier provient d'un effet de diffusion des hautes températures dans le noyau d'allumage par l'action de l'épaississement. Cette diminution de température s'accompagne d'une baisse de la vitesse de propagation (Fig. 6.9). Le phénomène de sur-adiabaticité observé en DNS se trouve fortement atténué. Cependant après 100 μs , les vitesses de flamme entre SGE et DNS sont similaires.

Pour les Fig. 6.8 et 6.9, le calcul 1D autorise à avoir 8 points pour résoudre le dépôt d'énergie. Une seconde limite au couplage ED-TFLES apparaît quand il n'est plus possible de mailler exactement la zone de dépôt de la bougie. C'est le cas souvent en 3D. Dans ce cas, il est possible d'agrandir la zone de dépôt tout en conservant la densité de puissance \dot{Q} (Tab. 6.2). Par exemple, l'allumage laminaire sphérique 3D a été répété sur un maillage plus grossier ($\Delta x/\delta_L^0 = 1.82$). Avec la formulation de l'épaississement dynamique, le nombre de points dans la flamme a été fixé à $n = 5 pts$. La bougie est épaissie afin de conserver un noyau initial suffisamment résolu. La taille du dépôt est ainsi de 2.8 mm au lieu des 2 mm

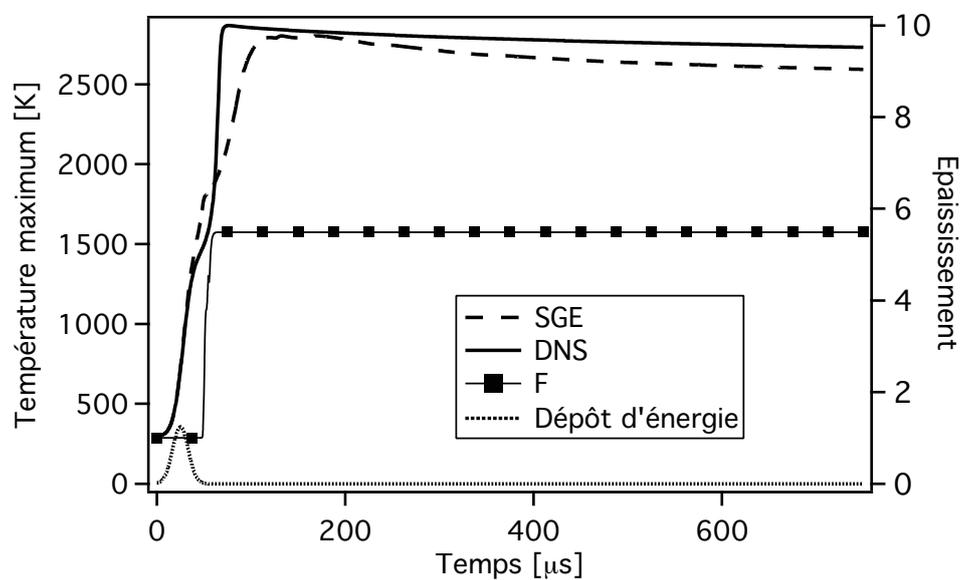


FIG. 6.8 - Comparaisons des évolutions temporelles de la température maximum entre la SGE (couplage du modèle TF et modèle d'allumage), et le cas DNS.

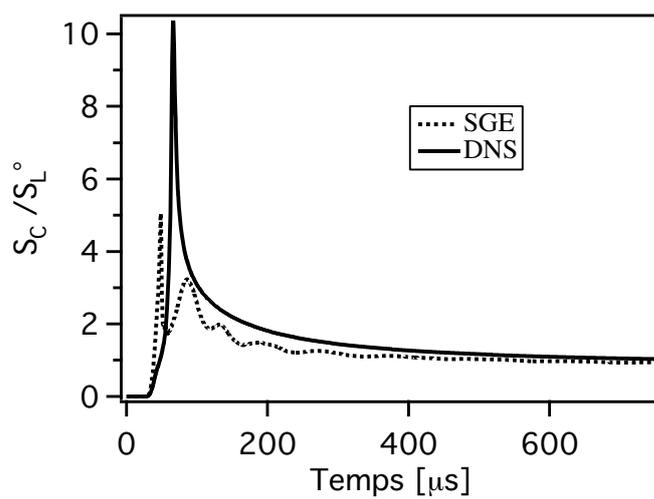


FIG. 6.9 - Comparaison de la vitesse de consommation entre la SGE et la DNS du cas 1D.

du cas DNS, et l'énergie ε_i est augmentée à 6.86 mJ au lieu de 2.5 mJ afin de conserver la densité de puissance \dot{Q} du cas DNS.

Comme pour le cas non-épaissi, on remarque que les résultats de la simulation sur la Fig. 6.10 sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Toutefois, il est à noter que le noyau est légèrement plus grand initialement en raison de l'épaississement de la bougie. En ce qui concerne la vitesse de flamme, les deux calculs montrent des comportements très similaires excepté à l'initiation. Un retard de la SGE par rapport à la DNS est observé après le dépôt d'énergie ce qui peut être une conséquence de l'épaississement : le modèle DTF diffuse rapidement les hautes températures rendant les gaz brûlés plus froids dans la SGE et ainsi retardent très légèrement l'emballement de la cinétique. Cependant, la croissance de la flamme épaissie suit de façon relativement parallèle les résultats expérimentaux.

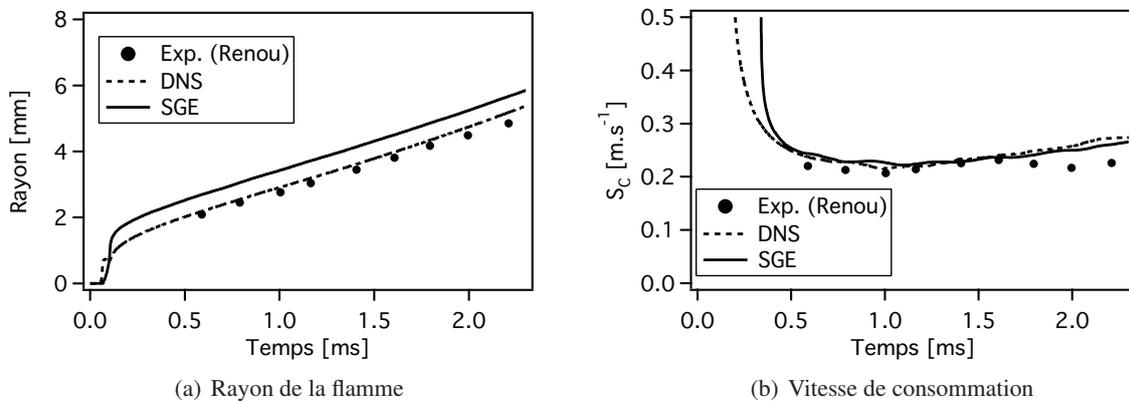


FIG. 6.10 - Comparaison d'un calcul couplé avec le modèle DTFLES (SGE) et d'un calcul DNS sur la configuration de l'ARC.

6.4.2 Influence de la résolution du dépôt

La section précédente a montré qu'il fallait parfois élargir la zone de dépôt de la bougie si la résolution est limitée. Nous avons quantifié ce critère : un exemple est donné sur le cas test 1D, Fig. 6.11, où quatre résolutions de dépôts sont testées (75, 15, 8 et 6 points dans le dépôt). On peut noter qu'au dessus d'une résolution de huit points pour modéliser la bougie, l'allumage aboutit à une propagation correcte de la flamme. On remarque également que la température maximum atteinte à la fin du dépôt ($t = 50 \mu\text{s}$) diminue avec la résolution du maillage. Dans le cas extrême où le dépôt est discrétisé par six points, la température du noyau d'allumage n'est pas suffisante pour mener à un emballement de la cinétique chimique.

Par la suite pour réaliser l'allumage du banc moteur F7P, un minimum de 10 points dans le dépôt d'énergie sera nécessaire afin d'éviter ces effets de dissipation dus à l'activation de la viscosité artificielle. Ceci mène à des maillages très fins près de la bougie, encore inutilisables il y a 3 ans mais devenus possibles sur les calculateurs actuels.

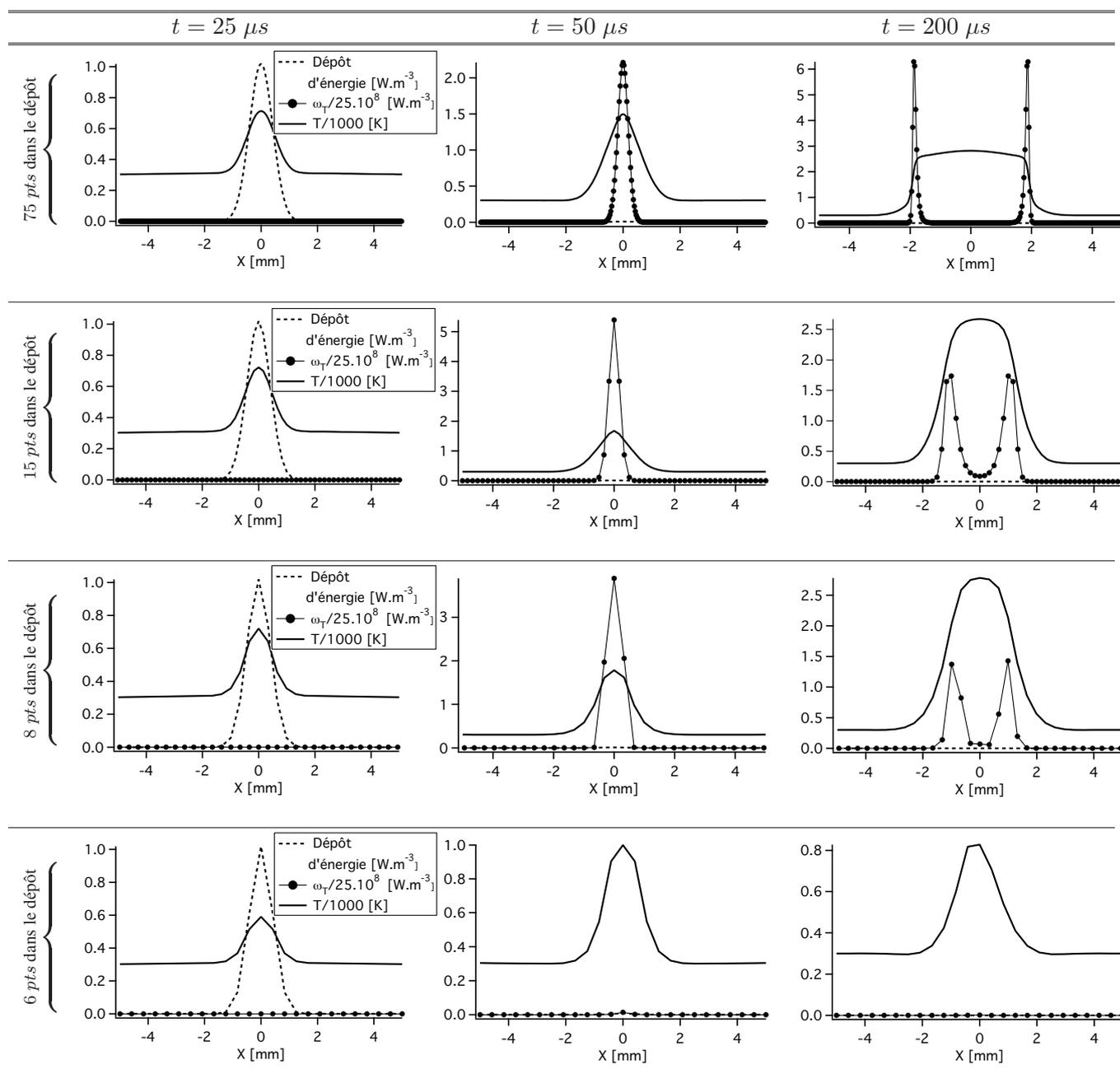


FIG. 6.11 - Influence de la résolution du dépôt d'énergie sur l'initiation de l'allumage (75, 15, 8 et 6 points). Pour chaque calcul, les paramètres du modèle de dépôt restent identiques, seule la résolution du maillage change. Les profils spatiaux de température, du dégagement de chaleur ($\dot{\omega}_T$) et de la densité de puissance (\dot{Q}) sont tracés aux instants $t = 25 \mu s$, $t = 50 \mu s$ et $t = 200 \mu s$.

6.5 Conclusion sur le modèle d'allumage par dépôt d'énergie

L'allumage par dépôt d'énergie induit une forte élévation locale de la température suivie d'un emballement de la cinétique. Dans les premiers instants, en raison d'un phénomène de sur-adiabaticité, la flamme se propage à une vitesse bien supérieure à la vitesse de flamme laminaire avant de tendre vers une vitesse de consommation laminaire. Un cas test 3D sur la configuration de l'ARC a montré qu'en dépit d'une prise en compte tronquée de la physique de l'allumage (les phases de *pre-breakdown*, de *breakdown* et d'arc sont négligées, seuls les effets de la phase de décharge sont recherchés), la croissance d'une flamme induite par un dépôt d'allumage s'avère assez proche des résultats expérimentaux. Le couplage du modèle ED avec le modèle TF donne des résultats similaires à la DNS que ce soit sur le cas 1D ou 3D. Pour parvenir à ces résultats, l'épaississement ne doit être déclenché qu'après le dépôt par l'intermédiaire d'une température seuil afin d'éviter une diffusion excessive des hautes températures du dépôt. Excepté un léger retard juste après le dépôt lié à une sur-adiabaticité moindre par effet d'épaississement, les vitesses de consommation atteintes par la DNS et la simulation avec flamme épaissie sont très proches. Cependant une résolution minimale de dix points dans le dépôt est requise.

Deuxième partie

Développement d'une méthodologie SGE en moteur entraîné

Table des matières

7	Evaluation des éléments tétraédriques en maillage mobile	117
7.1	Configuration expérimentale	118
7.2	Configuration numérique	119
7.3	Premier calcul SGE	122
7.4	Influence du raffinement de maillage	123
7.5	Influence du type d'élément	128
7.6	Conclusion	131
8	Simulation SGE du banc F7P en moteur entraîné	133
	LES of a motored single-cylinder piston engine	134
	Compléments au chapitre 8	163

Evaluation des éléments tétraédriques en maillage mobile

Bien que ce point n'est pas été abordé jusqu'ici, la qualité des maillages en SGE contrôle les résultats de façon plus importante que la plupart des sous modèles physiques. Ceci est encore plus vrai en SGE moteurs où la géométrie mobile rend l'exercice "maillage" crucial et coûteux en temps humain. Ce chapitre décrit les tests d'une stratégie de maillage basée sur les tétraèdres pour les cas moteurs. Cette stratégie très peu utilisée en géométrie mobile de moteur à piston présente des intérêts forts en terme de maillage et de temps CPU. Par contre sa précision peut poser problème avec de fortes déformations du domaine de calcul.

Pour les géométries de moteur, les simulations RANS ou SGE s'appuient classiquement sur des maillages hexaédriques (voir Tab. 1.3 de la section 1.2). Ces maillages nécessitent une organisation par blocs qui permet d'obtenir un bon contrôle de la répartition des cellules et une bonne qualité du maillage. Cependant leur utilisation pour mailler des configurations industrielles complexes s'avère assez délicate et requiert un coût de génération de la topologie assez long. Une difficulté supplémentaire en maillage hexaédrique est la gestion des raffinements : en effet, pour les maillages avec blocs coïncidents les raffinements de la topologie se propagent dans des endroits non désirés de la géométrie. En maillage tétraédrique, cet inconvénient est surmonté par l'utilisation de sources volumiques qui permettent d'avoir des raffinements locaux. Un autre atout des maillages tétraédriques provient de leur génération qui est quasi-automatique. Cependant, même pour une déformation simple de mouvement de piston, les angles des éléments tétraédriques se dégradent rapidement en prenant des formes aplatis contrairement aux hexaèdres où les angles restent inchangés. Ce type de déformation des tétraèdres peut mener à une dégradation des méthodes numériques puisque les meilleurs niveaux de précision sont obtenus avec les élément les plus réguliers [6].

Dans la simulation du banc moteur F7P, l'inclusion dans le domaine de calcul des lignes d'échappement et d'admission ainsi que des plenums aux extrémités nous oblige quasiment à utiliser du tétraèdre pour éviter l'accroissement du nombre de cellules par la propagation des raffinements dans les lignes. En maillage 2D, Moureau *et al.* [107] a montré sur des cas simples d'écoulement uniforme et d'ac-

célération constante de piston que les déformations du maillage n'engendrent pas de différences entre des éléments triangulaires et quadrangulaires. Pour évaluer l'utilisation de maillages 3D tétraédriques en maillage mobile, une configuration simplifiée de moteur entraîné a été choisie. Cette configuration, étudiée expérimentalement par Morse *et al.* [104] au moyen de mesures LDA (*Laser Doppler Anemometry* en anglais), fournit une caractérisation détaillée de l'écoulement pour la validation de code de calcul en géométrie moteur. Elle a ainsi déjà fait l'objet d'études numériques en SGE par Haworth [57], Soulères [146] et Verzicco *et al.* [161, 162], avec pour les deux premières une méthode ALE et pour les deux dernières une méthode IB (*Immersed Boundaries*). Toutes ces études ont été menées sur maillage hexaédrique.

Dans ce chapitre, plusieurs simulations ont été menées sur des maillages composés d'éléments tétraédriques et hexaédriques. Tout d'abord, la faisabilité d'une simulation de maillage mobile avec éléments tétraédriques a été étudiée. Par la suite l'impact du raffinement locale de zones clés (sièges de soupape) a été évalué. Ce maillage tétraédrique raffiné est ensuite comparé à une simulation menée sur un maillage composé d'éléments hexaédriques. Les études de l'impact du raffinement et de l'influence du type d'éléments ont été appuyées par les mesures expérimentales.

7.1 Configuration expérimentale

La configuration étudiée est schématisée en Fig. 7.1. Il s'agit d'un assemblage axi-symétrique cylindre-piston constitué d'un toit de culasse et d'un piston plats. Cette géométrie comporte une soupape centrale à levée fixe. Dans l'expérience, le piston est entraîné à une vitesse de rotation de 200 tr.min^{-1} , résultant en une vitesse moyenne du piston $U_P = 0.4 \text{ m.s}^{-1}$. Etant donné que la soupape est fixe, il n'y a ni compression ni détente. L'air entre par aspiration dans le cylindre pendant la descente du piston et est rejeté pendant sa remontée. Le nombre de Reynolds basé sur la vitesse moyenne du piston et le diamètre de l'alésage est estimé à 2000. Les paramètres géométriques sont résumés dans la Tab. 7.1. Sur cette configuration, plusieurs mesures LDA ont été reportées par Morse *et al.* [104]. Pour les angles vilebrequins $36^\circ V$, $90^\circ V$, $144^\circ V$ et $270^\circ V$, des profils radiaux de vitesses axiales moyennes ainsi que de vitesses axiales fluctuantes (ou RMS) espacés axialement de 10 mm à partir de la tête de culasse sont disponibles. Ces vitesses sont obtenues par une procédure de moyenne de phase. Par la suite, seuls les profils de vitesse moyenne et de RMS à $36^\circ V$ et $144^\circ V$ sont présentés, instants du cycle qui présentent respectivement un maillage faiblement et fortement étiré.

Alésage	$b = 2r$	75 mm
Course	s	60 mm
Taux de compression	$\tau = \frac{s+c}{c}$	3
Rayon de la tête de soupape	r_s	16.8 mm
Rayon du siège de soupape	r_a	20.8 mm
Epaisseur du siège	h	6.5 mm
Angle du siège	α	60°

TAB. 7.1 - Caractéristiques de l'expérience de Morse *et al.* [104].

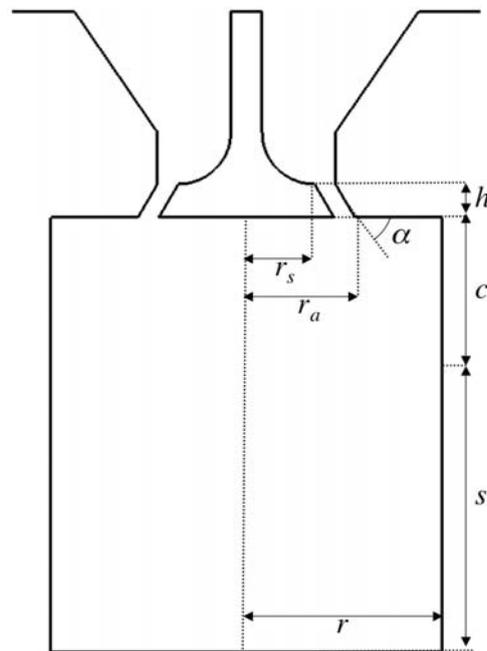


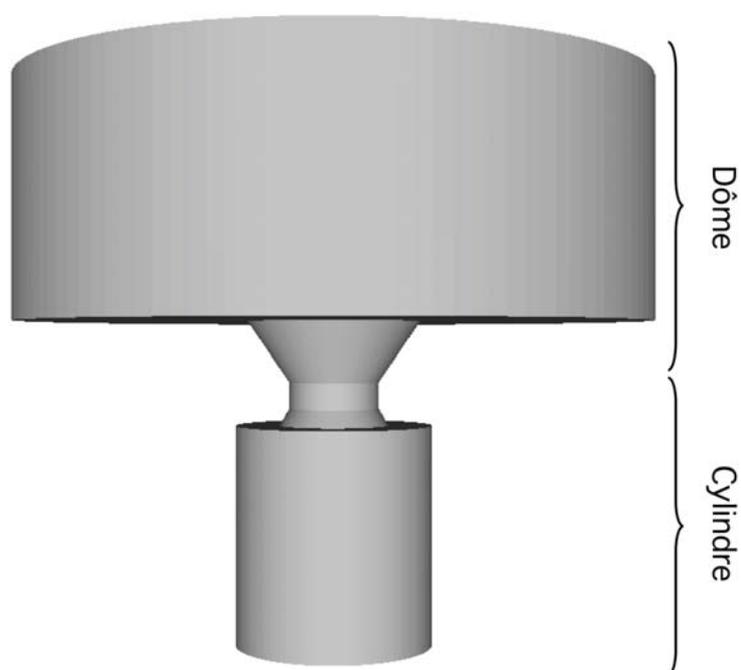
FIG. 7.1 - Schéma du montage expérimental [57].

7.2 Configuration numérique

Le domaine de calcul reproduit la configuration 3D du moteur entraîné. Pour éviter la modélisation d'une condition limite devant alterner entre un fonctionnement d'entrée puis un fonctionnement de sortie au dessus de la chambre, l'admission est faite à partir d'un dôme dix fois plus grand en volume que le cylindre (Fig. 7.2). Ceci permet à la pression de rester quasi constante dans le dôme. Le domaine de calcul se trouve par cet artefact uniquement constitué de parois et complètement fermé. La même méthodologie a déjà été utilisée par Haworth [57] et Soulères [146].

Pour évaluer l'utilisation des maillages tétraédriques en géométrie mobile, deux maillages possédant des discrétisations différentes ont été conçus sous CENTAURSOFT [24]. Le premier maillage tétraédrique, noté M_{T1} , possède au point mort haut (PMH) des cellules de taille caractéristique $\Delta x = 1 \text{ mm}$. Le second maillage plus fin, noté M_{T2} , a été réalisé pour tester l'influence du raffinement du siège de soupape et du cylindre avec une taille de cellule $\Delta x = 0.7 \text{ mm}$. Un troisième maillage M_H , cette fois ci hexaédrique, a finalement été construit sous ICEMCFD [5] avec une résolution similaire à celle du maillage M_{T2} dans le cylindre et le rideau de soupape. Les caractéristiques de ces trois maillages sont rappelées dans la Tab. 7.2.

Chaque maillage est généré au point mort haut. Au cours du cycle le maillage est uniquement déformé dans la partie cylindre suivant une loi harmonique de piston (voir chapitre 2 du Heywood [59]). Le maillage se trouve ainsi fortement étiré pendant la détente puis revient à sa forme initiale pendant la compression. Chaque nouveau cycle débute alors avec le même maillage. Ce test est un cas extrême

FIG. 7.2 - *Domaine de calcul.*

puisque on ne fait pas intervenir de phase de remaillage avec interpolation qui aurait certainement améliorée les résultats.

Des coupes verticales et horizontales des maillages les plus fins (M_H et M_{T2}) sont présentées sur la Fig 7.3 pour l'angle $36^\circ V$.

Nom	M_H	M_{T1}	M_{T2}
Type d'éléments	Hexaèdres	Tétraèdres	Tétraèdres
Cellules	490 000	1 396 000	4 792 000
Noeuds	511 000	253 000	855 000
Taille dans le cylindre	0.7 mm	1 mm	0.65 mm
Nombre de cellules dans le siège de soupape	11	5	11

TAB. 7.2 - *Caractéristiques des maillages hexaédrique (M_H) et tétraédriques (M_{T1} et M_{T2}).*

Afin d'initialiser les différents calculs présentés par la suite, pour chacun des maillages, un cycle SGE a été réalisé en partant d'une solution initiale à vitesse nulle, pression et température constantes (i.e. $P = 1.01325 \times 10^5 Pa$ et $T = 300 K$).

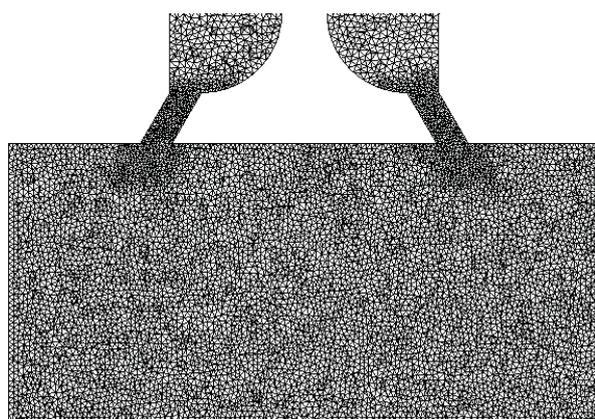
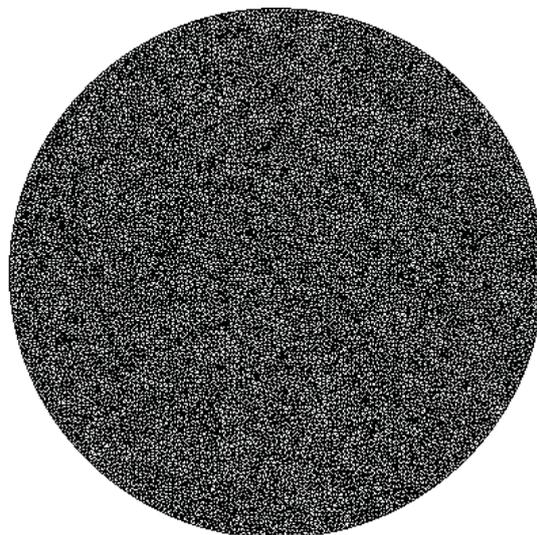
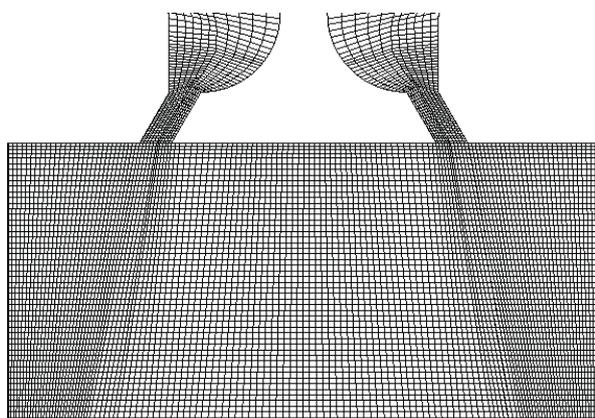
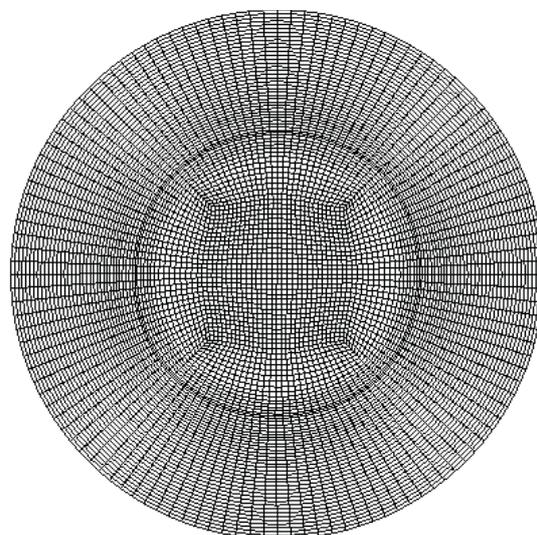
(a) M_{T_2} : Coupe verticale du cylindre(b) M_{T_2} : Coupe horizontale(c) M_H : Coupe verticale du cylindre(d) M_H : Coupe horizontale

FIG. 7.3 - Coupes verticales et horizontales des maillages tétraédrique (a et b) et hexaédrique (c et d).

7.3 Premier calcul SGE

Un premier calcul est réalisé avec le maillage tétraédrique M_{T1} pour évaluer la capacité de la SGE à prédire la dynamique du jet annulaire de soupape sur le maillage le moins fin. Les murs sont modélisés par des lois de paroi adiabatiques glissantes et un modèle de Smagorinsky standard ($C_S = 0.18$) est utilisé comme modèle de sous-maille. En excluant le premier cycle afin d'éviter une pollution de la solution initiale, des statistiques sont réalisées sur 6 cycles consécutifs. A une hauteur axiale donnée, ces statistiques sont obtenues en réalisant dans un premier temps une moyenne d'ensemble. De plus, pour compenser le petit nombre de cycles simulés, une moyenne azimutale sur 36 rayons espacés de 10° est calculée grâce au caractère axi-symétrique de la configuration. La moyenne ainsi obtenue par le calcul diffère dans sa conception de celle réalisée dans l'expérience qui ne fait pas intervenir de moyenne spatiale. Cependant, elle permet d'obtenir sur un nombre de cycles relativement faible des statistiques convergées.

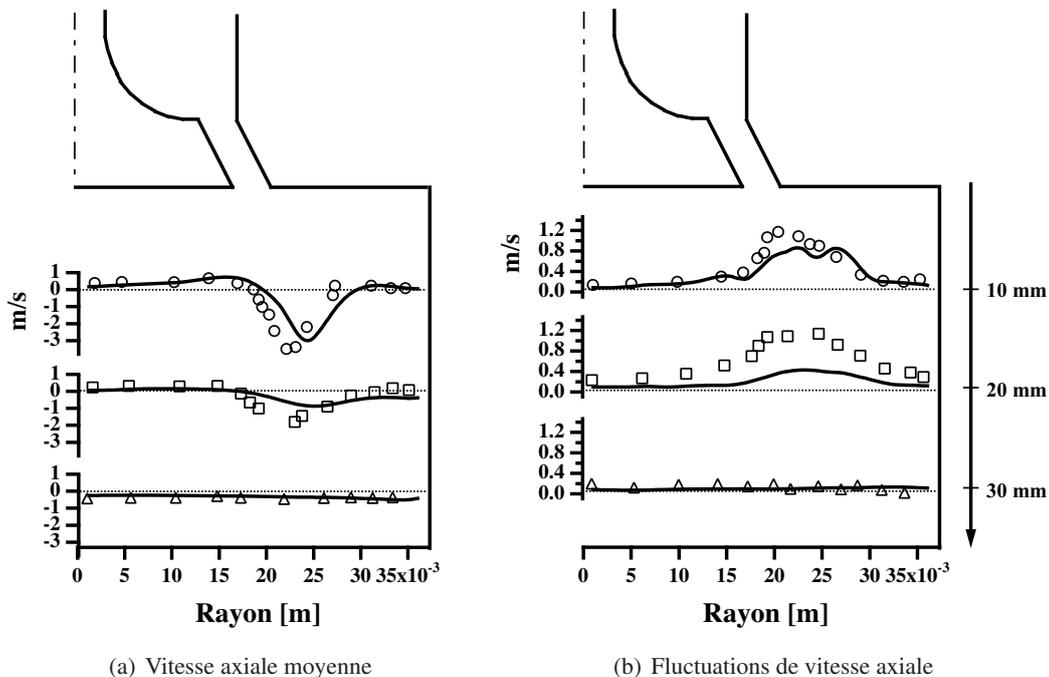


FIG. 7.4 - Profils à différentes hauteurs de la composante axiale de la vitesse moyenne et RMS en début de détente ($\text{Angle} = 36^\circ V$). Symboles : mesures expérimentales, Ligne : résultats SGE du maillage M_{T1} .

La Fig. 7.4 représente une comparaison entre la SGE et les mesures LDA des profils de vitesse axiale moyenne et de sa fluctuation pour l'angle $36^\circ V$. Sur les mesures expérimentales, on remarque la forme du jet de soupape avec un maximum à $r = 23 \text{ mm}$ et une zone de recirculation centrale assez légère entre $r = 0 \text{ mm}$ et $r = 15 \text{ mm}$. Dès le second profil sous la culasse à $z = 20 \text{ mm}$, le jet de soupape est fortement amorti. Le mouvement du fluide en fond de chambre est quant à lui fortement lié à la dynamique du piston puisque les vitesses sont de l'ordre de U_P .

Le calcul SGE capture de manière acceptable la zone de recirculation centrale et la position du jet. Cependant, la Fig. 7.4(a) montre que le jet prédit par la SGE est dévié vers la paroi comparé aux mesures expérimentales. Une sous-résolution du jet dans le siège de soupape peut être une explication de cette erreur, éventualité qui sera étudiée dans la section 7.4. Sur le deuxième profil de vitesse axiale, on remarque également que le pénétration du jet est fortement atténuée, ce qui provient probablement de l'insuffisance de discrétisation du maillage dans le cylindre.

Comme illustré sur la Fig. 7.4(b), les fluctuations de vitesses axiales en début de détente sont correctement prédites en position. Juste en sortie du siège de soupape, le niveau de fluctuation prédit par la SGE est en bon accord avec celui des mesures expérimentales. Ensuite, la fluctuation prédite par la SGE diminue plus rapidement que celle mesurée dès que l'on s'éloigne de la tête de culasse. Cette sous-prédiction des fluctuations à $z = 20 \text{ mm}$ est cohérente avec des niveaux moyens calculés qui sous-évaluent les niveaux expérimentaux.

A $144^\circ V$, Fig. 7.5(a), les mesures expérimentales de vitesse axiale moyenne montrent que le jet de soupape impacte la paroi dès 20 mm en dessous de la tête de culasse, et la zone de recirculation centrale s'étend jusqu'à $r = 25 \text{ mm}$. Cette zone de recirculation n'est pas présente toutefois dans le bas du cylindre (les deux derniers profils) dont la dynamique semble plus affectée par la descente du piston que par le jet de soupape en proche paroi.

A cet instant du cycle, les différences entre SGE et expérience sur la moyenne de la vitesse axiale sont plus importantes que précédemment. Sur les trois premiers profils, l'intensité de vitesse est bien prédite mais la position du jet est déviée vers l'intérieure de la chambre. En fond de cylindre, les différences entre le calcul et l'expérience sont assez grandes notamment en proche paroi. L'utilisation de la loi de paroi peut expliquer en partie ces différences. Comme on peut l'observer dès le quatrième profil sous la tête de culasse, la loi de paroi impose une forte vitesse de glissement au mur qui provoque une pénétration du jet dans le cylindre plus importante. En prédisant un écoulement du jet à la paroi plus intense que ce qu'il devrait être, la zone de recirculation sur les derniers profils s'en trouve alors faussée.

La déviation du jet prédit par la SGE se retrouve sur les valeurs RMS de la vitesse axiale (Fig. 7.5(b)). On remarque également que la loi de paroi qui surprédit la vitesse pariétale intensifie la fluctuation près des murs. Dans la zone centrale, les RMS sont bien prédites.

7.4 Influence du raffinement de maillage

Les résultats précédents ont montré que les vitesses axiales moyennes et fluctuantes sont globalement bien prédites en début de détente, cependant en fin de détente les écarts entre expérience et SGE sont significatifs. Une raison pouvant expliquer autant de différences peut être une résolution insuffisante dans le siège de soupape et dans le cylindre. Une simulation de six cycles moteurs a été réalisée sur le maillage M_{T2} avec les mêmes paramètres numériques que le calcul effectué sur M_{T1} . Le maillage M_{T2} est deux fois plus raffiné dans les sièges de soupapes et la taille caractéristique des éléments dans le cylindre a été divisée par un facteur 1.4. Dans cette section, les résultats issus du maillage plus fin M_{T2} sont comparés à ceux issus du maillage M_{T1} .

Qualitativement, le champ moyen de vitesse à $36^\circ V$ (Fig. 7.6) montre que le raffinement du maillage modifie la prédiction de l'orientation du jet de soupape. Ce résultat est montré de manière plus quantita-

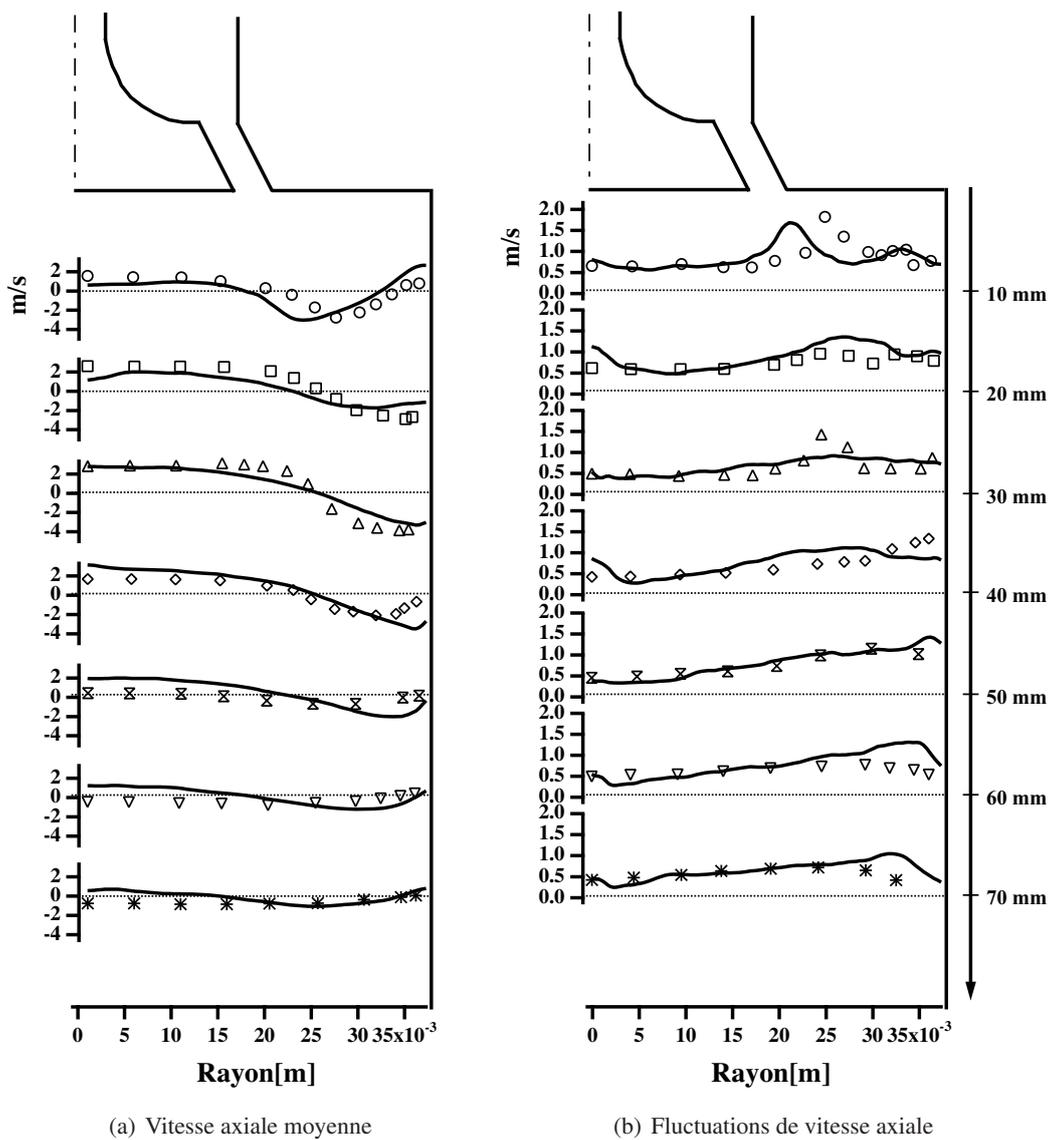


FIG. 7.5 - Profils à différentes hauteurs de la composante axiale de la vitesse moyenne et RMS en fin de détente ($\text{Angle} = 144^\circ \text{V}$). Symboles : mesures expérimentales, Ligne : résultats SGE du maillage M_{T1} .

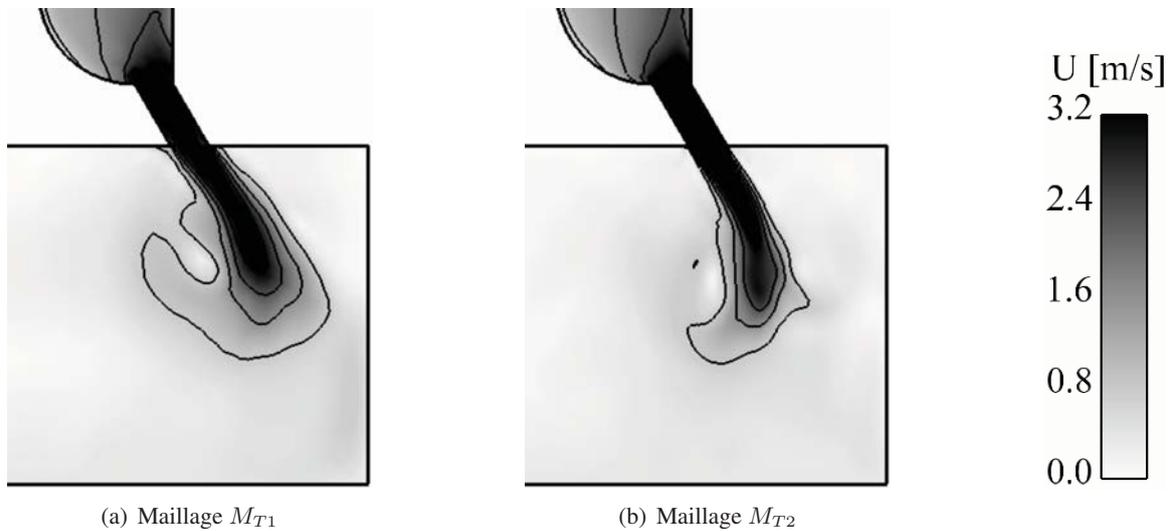


FIG. 7.6 - Comparaison de l'orientation du jet de soupape à $36^\circ V$. Champs de magnitude de vitesse moyenne.

tive (voir Fig. 7.7(a)) sur le premier profil de vitesse axiale moyenne sous la tête de culasse : l'orientation ainsi que l'intensité du pic de vitesse axiale prédites par le maillage M_{T2} est en très bon accord avec les mesures LDA. Ce comportement se retrouve également sur le second profil même si les différences entre le maillage M_{T1} et le maillage M_{T2} sont moins flagrantes.

Comme le montre la Fig. 7.7(b), l'apport du raffinement est très net sur le profil de vitesses fluctuantes à 20 mm sous la tête de culasse. En effet la forme ainsi que l'intensité des RMS sont bien prédites par le maillage le plus fin : le jet se trouve moins ralenti sur le maillage M_{T2} , augmentant ainsi la fluctuation de la vitesse axiale. Ceci s'explique par la réduction des tailles de mailles qui assure une activité moindre du modèle de sous-maille, la dissipation étant ainsi diminuée au profit de la prédiction de l'intensité du pic du jet.

En fin de détente, la Fig. 7.8 montre que le raffinement de maillage n'est pas la cause principale des différences entre SGE et mesures expérimentales puisque le maillage M_{T2} n'améliore pas les prédictions en fond de chambre, que ce soit sur les vitesses axiales moyenne ou fluctuante. On remarque également que la vitesse à la paroi est toujours sur-prédite. A cet instant du cycle moteur, les cellules dans le cylindre sont fortement étirées ce qui peut potentiellement dégrader la qualité de la numérique et ainsi expliquer les erreurs de prédictions observées pour cette position du piston. Ainsi il semble intéressant de comparer les résultats du maillage tétraédrique le plus fin M_{T2} aux résultats d'un maillage composé d'hexaèdres où la dégradation de la qualité des éléments liée à la descente du piston est moins abrupte.

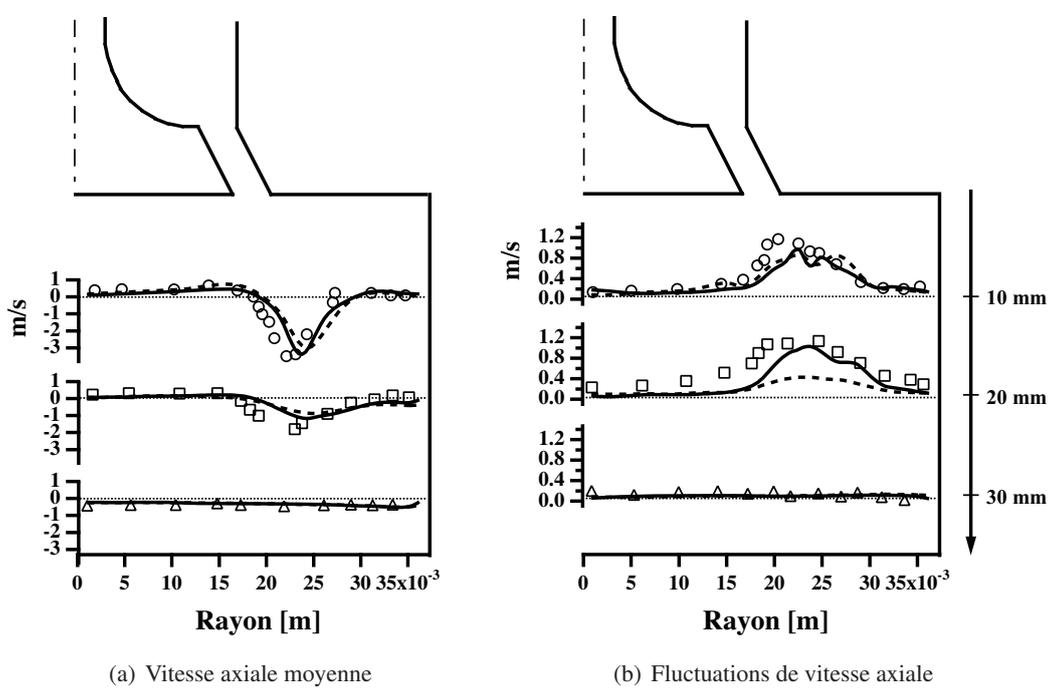


FIG. 7.7 - Profils à différentes hauteurs de la composante axiale de la vitesse moyenne et RMS en début de détente (Angle = $36^\circ V$). Symboles : mesures expérimentales, Ligne pleine : résultats SGE du maillage M_{T2} , Ligne pointillée : résultats SGE du maillage M_{T1} .

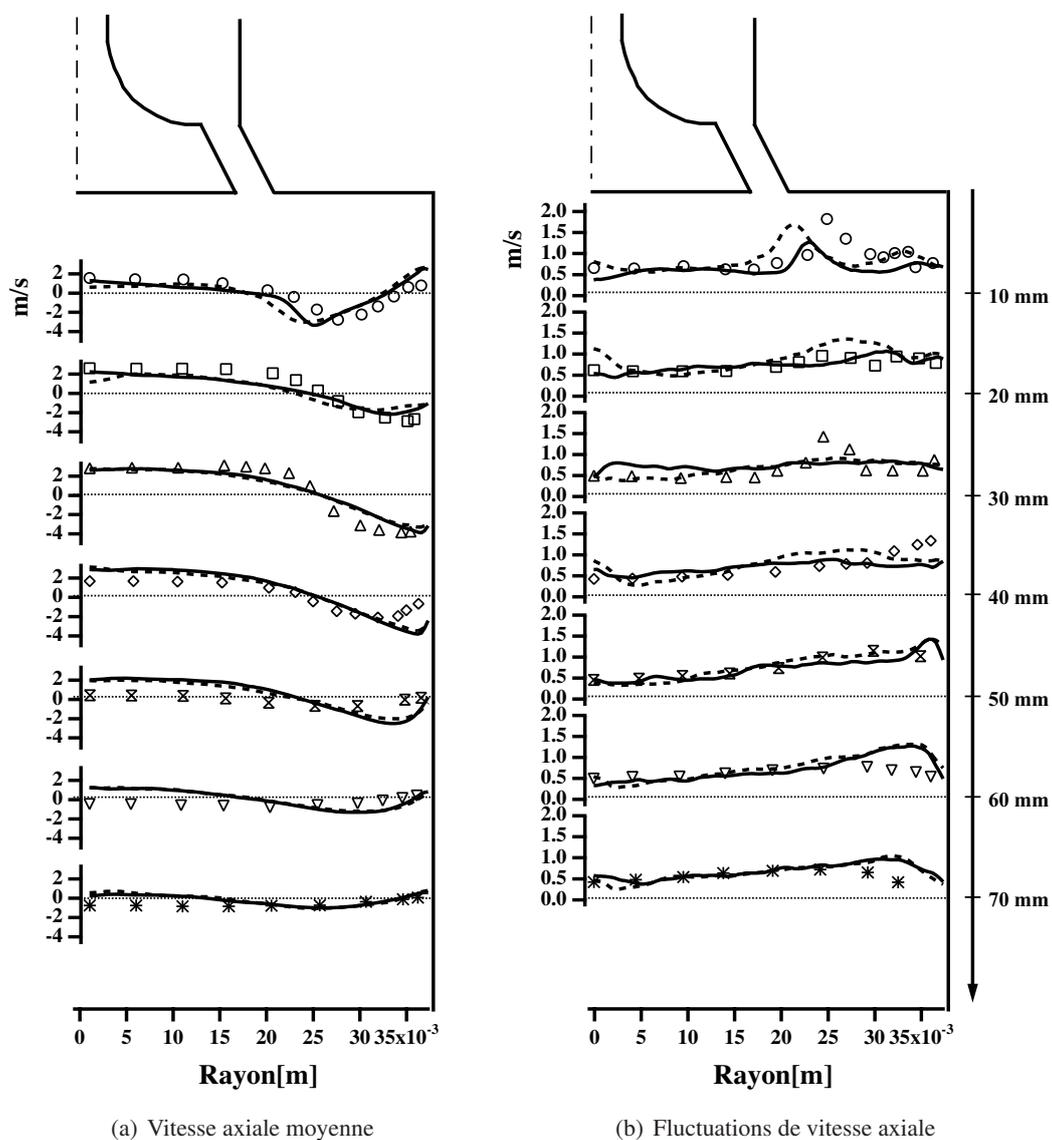


FIG. 7.8 - Profils à différentes hauteurs de la composante axiale de la vitesse moyenne et RMS en fin de détente (Angle = $144^\circ V$). Symboles : mesures expérimentales, Ligne pleine : résultats SGE du maillage M_{T2} , Ligne pointillée : résultats SGE du maillage M_{T1} .

7.5 Influence du type d'élément

Pour comparer maillages tétraédrique et hexaédrique, un calcul SGE est réalisé sur le maillage M_H et ses résultats sont confrontés à ceux issus du maillage M_{T2} .

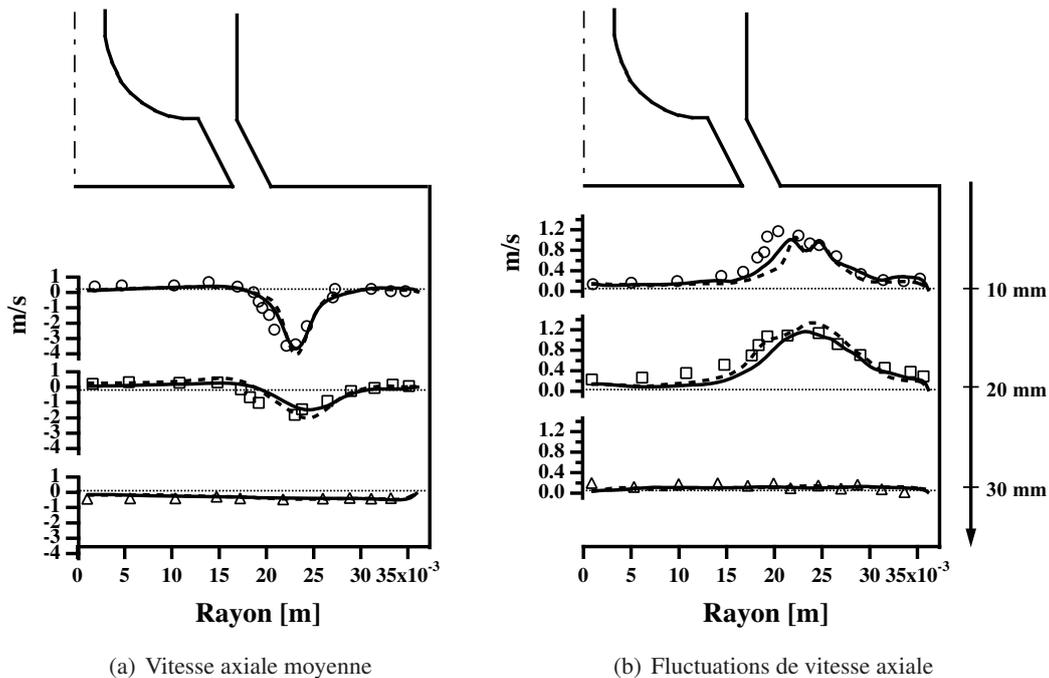


FIG. 7.9 - Profils à différentes hauteurs de la composante axiale de la vitesse moyenne et RMS en début de détente ($Angle = 36^\circ V$). Symboles : mesures expérimentales, Ligne pleine : résultats SGE du maillage M_H , Ligne pointillée : résultats SGE du maillage M_{T2} .

Pour une déformation faible des éléments ($Angle = 36^\circ V$), la Fig. 7.9 montre que les statistiques de l'écoulement obtenues sur maillage hexaédrique et tétraédrique sont très semblables. Le pic de vitesse axiale lié au jet est légèrement moins intense à 20 mm sur le maillage hexaédrique, cependant la position du jet prédite par les deux SGE est identique. Au niveau des fluctuations, les comportements des deux maillages sont similaires quelque soit la hauteur observée.

Les différences les plus notables se trouvent quand les éléments sont fortement étirés ce qui est le cas de l'angle $144^\circ V$. La Fig. 7.10 montre que les éléments tétraédriques, réguliers en début de cycle (Fig. 7.3), ont à cet instant des ratios d'aspect (définis comme le rapport entre le rayon du cercle circonscrit et le rayon du cercle inscrit) qui ont augmenté avec l'étirement. Les éléments tétraédriques sont fortement aplatis dans la direction radiale menant à des angles largement supérieurs à 90° ou inversement à de très petits angles. Cette dégradation de la qualité en forme s'accompagne d'une dégradation de la taille des cellules qui diminue le pas de temps de la simulation. Les éléments hexaédriques sont également étirés mais avec une déformation aussi simple qu'une compression/détente, les éléments ont

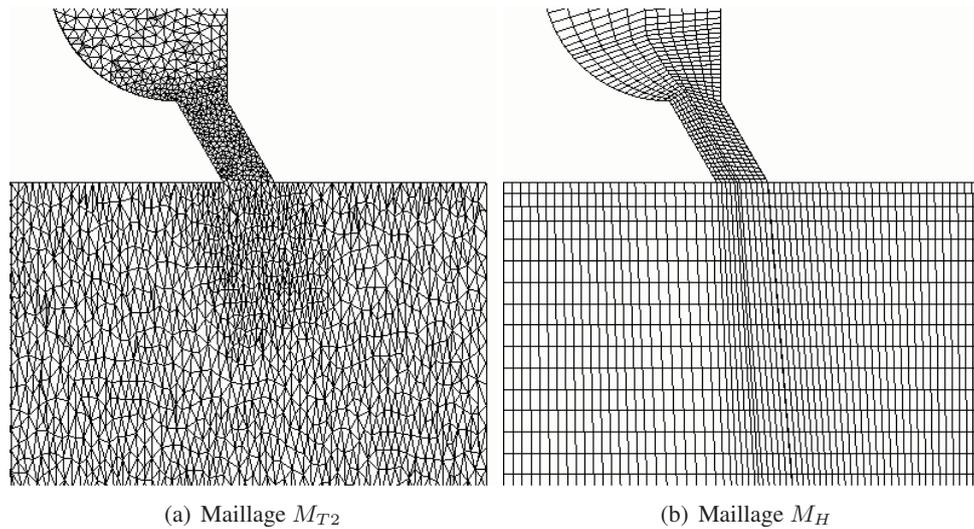


FIG. 7.10 - Déformation des éléments en fin de détente.

des angles qui ne varient pas et restent alignés avec l'écoulement. L'écoulement est alors mieux prédit par les hexaèdres que ce soit au niveau de la moyenne ou des fluctuations de vitesse axiale comme le montre la Fig. 7.11. Sur la moyenne, ces meilleures prédictions sont surtout notables en fond de chambre sur les profils à 50, 60 et 70 mm où l'intensité et la forme des mesures expérimentales sont bien capturées par le maillage hexaédrique contrairement au maillage tétraédrique. Pour les fluctuations, dès le premier profil le maillage tétraédrique sous-estime le niveau des mesures expérimentales contrairement au maillage hexaédrique qui est en accord avec l'expérience.

Cette comparaison permet également d'appréhender un aspect qui sera essentiel pour la simulation du banc moteur F7P : l'efficacité du code AVBP suivant le type d'élément. La Table 7.3 compare les coûts de calcul nécessaires pour réaliser un cycle moteur ($360^\circ V$) suivant que l'on utilise des éléments hexaédriques ou tétraédriques.

Si l'on considère que deux maillages composés d'éléments de types différents sont comparables si la

Maillage	Temps CPU total	Efficacité	
	[h]	/itération/noeud [μs]	/itération/cellule [μs]
M_H	4 097	43.64	45.57
M_{T2}	11 100	34.71	6.2

TAB. 7.3 - Efficacité du code AVBP sur un cycle moteur suivant le type d'éléments. Les temps sont donnés pour un processeur d'un cluster SGI Altix ICE 8200.

racine cubique du volume de leurs cellules est identique, alors le nombre de cellules doit être similaire entre les deux maillages. Etant donné que le maillage M_H et M_{T2} n'ont pas le même nombre de cellules, le seul paramètre qui donne une information sur le coût suivant le type d'élément utilisé est l'efficacité du code par itération et par cellules. A volumes de cellule égaux, utiliser des éléments tétraédriques coûte

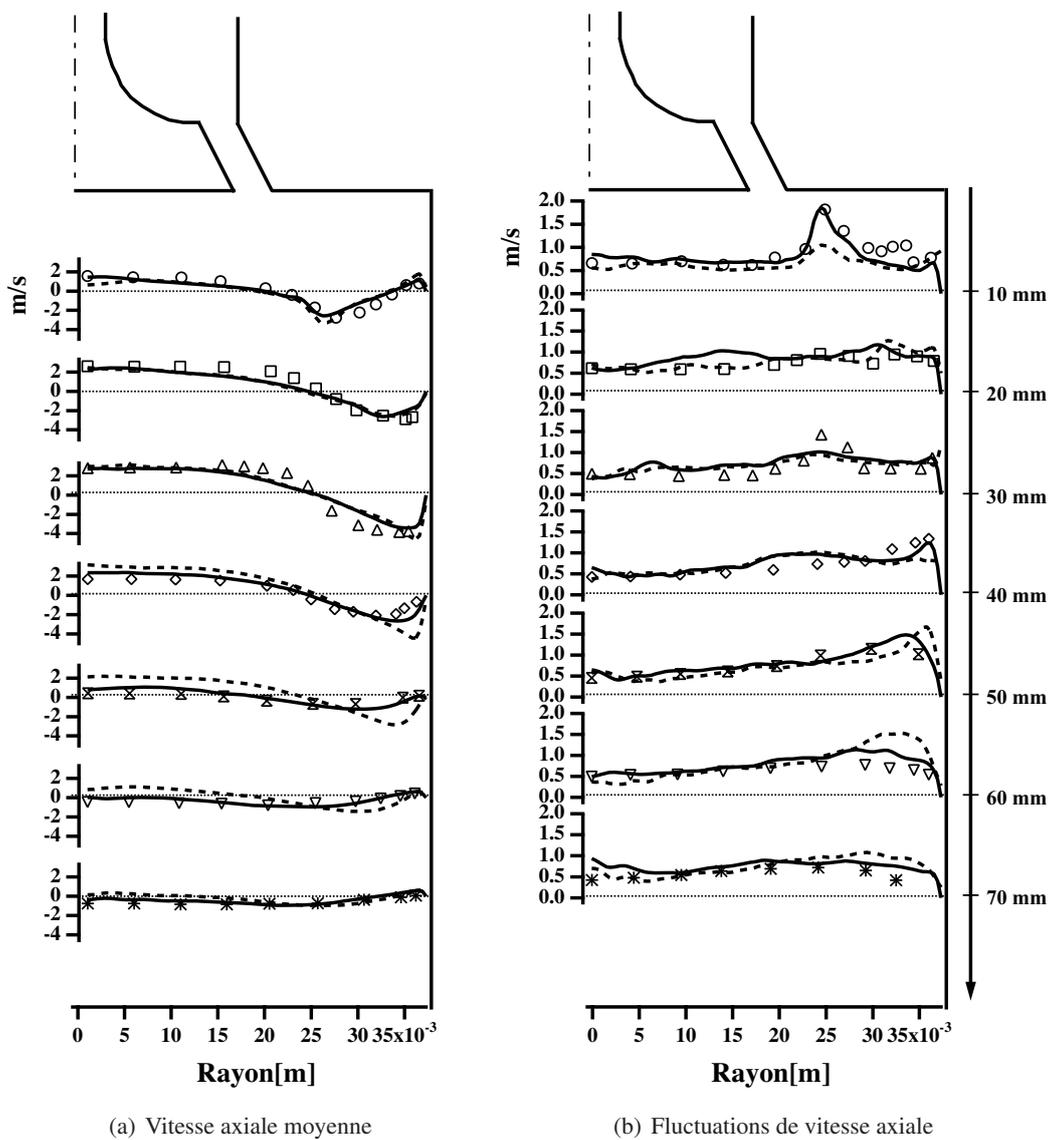


FIG. 7.11 - Profils à différentes hauteurs de la composante axiale de la vitesse moyenne et RMS en fin de détente (Angle = 144°). Symboles : mesures expérimentales, Ligne pleine : résultats SGE du maillage M_H , Ligne pointillée : résultats SGE du maillage M_{T2} .

sept fois moins cher que de réaliser la simulation avec des hexaèdres. Toutefois, si l'on veut des maillages avec une taille caractéristique de cellule équivalente, un maillage tétraédrique comporte environ 5 fois plus de cellules qu'un maillage hexaédrique. Il est alors délicat de conclure que la simulation menée sur éléments tétraédriques est beaucoup plus rapide qu'une simulation menée sur maillage hexaédrique.

7.6 Conclusion

Dans ce chapitre, des SGE d'une configuration de moteur simplifiée ont été réalisées et confrontées à des mesures expérimentales. Ces simulations avaient pour objectif d'évaluer les éléments tétraédriques en maillage mobile puisque ce type de maillage présente des avantages non-négligeables dans leur génération :

- le temps humain qui doit y être consacré ;
- un meilleur contrôle du nombre de cellules grâce aux raffinements locaux de la géométrie ;
- et un meilleur contrôle du pas de temps de la simulation : les raffinements locaux évitent la propagation de nombreuses cellules dans des endroits non désirés de la géométrie où leurs volumes sont fortement contraints.

Ce type de maillage a alors été confronté aux résultats d'un maillage composé d'hexaèdre, classiquement utilisé en SGE de moteur à piston. Cette comparaison a montré les limites des tétraèdres fortement déformés qui conduisent à une dégradation rapide des résultats contrairement aux maillages hexaédriques. Cependant, les tétraèdres présentent l'avantage d'avoir un coût inférieur à celui des hexaèdres dans le code AVBP. L'étude sur le raffinement du maillage tétraédrique a montré que le siège de soupape nécessite une bonne résolution pour prédire la direction du jet. Il est alors préconisé d'avoir un minimum de 10 points entre le siège et la tête de la culasse, quand l'ouverture de la soupape le permet (hors levées résiduelles).

Ces deux études montrent qu'il n'y a pas de facteur bloquant dans l'utilisation de maillages tétraédriques pour une configuration mobile. Cependant, une attention particulière doit être portée à la distorsion des éléments tétraédriques qui, à forts étirements, dégradent plus rapidement la prédiction des schémas numériques qu'un maillage composé d'hexaèdres. Pour modéliser le banc moteur F7P, le nombre de phases de remaillage doit donc être plus conséquent que ce qui est classiquement rencontré pour des modélisations SGE qui utilisent des maillages hexaédriques (~ 20 remaillages [155, 160]).

Simulation SGE du banc F7P en moteur entraîné

Ce chapitre se présente sous la forme d'un article soumis à *Flow, Turbulence and Combustion*. Cet article étant écrit en anglais, son introduction est en partie traduite en français ci-dessous. Des informations complémentaires portant sur des points de modélisation sont ajoutés en fin de section.

Le chapitre 7 a présenté l'étude d'une configuration simplifiée de moteur entraîné qui a orienté la modélisation du banc moteur mono-cylindre vers des éléments tétraédriques. Bien que présentant des mesures expérimentales, cette configuration trop simplifiée (soupape à levée fixe, moteur 2 temps, aucun point de fonctionnement avec combustion) reste assez limitée pour l'étude des VCC. Ce manque de données expérimentales a déjà été souligné par plusieurs auteurs [23, 41, 160]. Le projet ANR SGEmac a été réalisé pour surpasser cette difficulté avec une large diversité de points acquis sur un moteur quatre soupapes à allumage commandé. Cette base de donnée inclue de nombreux points de fonctionnement tels que des points à froid ainsi que des points avec combustion caractérisés par diverses diagnostics (Vélocimétrie par Image de Particules (PIV), sondes de pression rapides, Fluorescence des radicaux OH Induite par Laser (LIF-OH) et chimiluminescence). C'est probablement aujourd'hui la base de données expérimentales dédiée aux VCC la plus complète.

Pour cette géométrie bien plus complexe, la méthodologie s'est orientée vers la simulation du dispositif expérimental quasi complet. Ce choix de modélisation présente des inconvénients comme le temps CPU (domaine de ~ 2.5 m de long), et des efforts de modélisation supplémentaires doivent également être fournis (les arrêtes-flamme). Il offre également deux avantages non négligeables :

- le domaine de calcul permet de calculer explicitement les phénomènes acoustiques sources potentielles de VCC [56, 41] ;
- les conditions aux limites imposées aux plenums sont simples à définir, et les difficultés des précédentes SGE de moteur à piston sont ainsi évitées [56]. Dans la plupart des simulations [50, 126, 160], les conditions aux limites sont imposées à proximité du cylindre, au niveau des pipes d'admission et d'échappement, ce qui oblige à surmonter plusieurs difficultés comme de l'injection de turbulence, le traitement du reflux de gaz à l'ouverture des soupapes ou la réflexion des ondes

acoustiques aux conditions aux limites.

L'objectif de ce chapitre est de présenter la SGE du point de fonctionnement *stab_ref* à froid du banc moteur F7P (noté par la suite *moteur entraîné*). Ce calcul réalisé sur 400 processeurs d'un cluster SGI Altix ICE 8200¹ constitue une étape essentielle de validation avant les calculs de points plus compliqués modélisant la combustion. Ce point qui présente de faibles variations de pression ($< 1\%$) est idéal pour valider la méthodologie mise en place. Pour assurer un échantillon statistique suffisamment représentatif, 27 cycles consécutifs ont été simulés. Ce chapitre commence ainsi à discuter de l'importance des ondes acoustiques dans les lignes d'admission et d'échappement, et montre comment ces modes peuvent être calculés avec un autre code du CERFACS issu du monde des turbines à gaz. Il est alors montré par la suite que la SGE retranscrit le comportement acoustique ainsi que l'aérodynamique mesurés dans les essais. Le caractère *multi-cycles* de cette simulation permet également de mettre en avant des variations cycliques sur la vitesse dans le cylindre.

Des compléments à cet article sont fournis en fin de partie. Ils décrivent la modélisation du croisement de soupapes ainsi qu'une comparaison avec un calcul équivalent sur maillage hexaédrique, et discutent l'aspect parallèle du calcul sans lequel il n'aurait pu être réalisé.

¹Calculateur du Grand Equipement National de Calcul Intensif (GENCI) basé à Montpellier au Centre informatique national de l'enseignement supérieur (CINES). Il est au rang 28 du Top 500 des supercomputers de Novembre 2009 (<http://www.top500.org/list/2009/11/100>).

Large Eddy Simulation of a motored single-cylinder piston engine: numerical strategies and validation

B. Enaux^{*,a,b}, V. Granet^{a,c}, O. Vermorel^a, C. Lacour^d, T. Poinsot^e

^aCERFACS, CFD Team, 42 Avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France

^bPSA Peugeot Citroën - DRIA, 2 Route de Gisy, 78943 Velizy-Villacoublay Cedex, France

^cRenault SAS, 1 Avenue du Golf, 78288 Guyancourt Cedex, France

^dIFP, 1 & 4 Avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison Cedex, France

^eUniversité de Toulouse, IMFT, France

Abstract

This paper describes a compressible Large Eddy Simulation (LES) used to investigate cyclic variations for nonreacting flow in an optical single cylinder engine setup. The simulated operating point is part of a large experimental database designed to validate LES for cycle-to-cycle prediction, and constitutes a first step towards the realization of fired operating points. The computational domain covers almost the whole experimental setup (intake and exhaust plenums, intake and exhaust ducts, cylinder) to account for acoustic phenomena. The assessment of the computation is performed in two regions of the domain: the intake and exhaust duct predictions are compared to the results of a Helmholtz solver and the experiment (pressure transducers and Particle Image Velocimetry (PIV)) while the in-cylinder dynamics are confronted to PIV measurements. The ability of the developed methodology to capture the correct level of cycle-to-cycle variations is demonstrated considering in-cylinder pressure and velocity fields predictions. Cycle-to-cycle variations in velocity are highlighted and localized using a proper orthogonal decomposition analysis.

Key words: Internal combustion engine, Multi-cycle Large-Eddy Simulation, Cycle-to-cycle variations, Unstructured grids, Acoustic

1. Introduction

A major challenge for the development of Internal Combustion (IC) engines is to improve fuel economy and to reduce pollutant emissions while maintaining or enhancing engine performances. New strate-

*Corresponding author.

Address: CERFACS, CFD Team, 42 Avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France.

Tel: +33 (0)5 61 19 30 33; fax: +33 (0)5 61 19 30 00.

Email address: enaux@cerfacs.fr (B. Enaux)

gies using stratified charge direct injection or downsizing with high levels of exhaust gas recirculation have this potential, but can impact on the combustion stability and trigger high Cycle-to-Cycle Variations (CCV).

Nowadays Computational Fluid Dynamic (CFD) applied to engine development mainly relies on the Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS) approach which solves ensemble or phase-averaged mean quantities. However, this method does not provide information about individual cycles. The study of cycle-to-cycle variability is thus impossible and other numerical methods such as LES (Large Eddy Simulation) must be employed. LES of laboratory-scale but also real turbulent combustors, such as gas turbine chambers, have recently appeared in the literature [29, 2, 34, 13]. In comparison to numerous publications related to gas turbines for example, LES of IC engines is still a field to explore.

Two major reviews, one by Haworth [20] and the other by Celik *et al.* [5], summarize the work accomplished by the LES engine community. They both highlight the potential of LES for predicting the details of the transient in-cylinder flow dynamics and demonstrate that LES is able to produce superior predictions than any of the current RANS approaches. They also support the view that LES can provide essential information in regard to the nature and origins of CCV. However, they both underline that computational cost is a major shortcoming that LES will have to overcome to ensure its practical use. Indeed, by nature, CCV can only be studied by performing multiple cycles and statistical analysis. 25 cycles are reported to be a minimum for a correct sampling in terms of mean values and 50 cycles are probably necessary to yield reliable statistics in terms of fluctuations [21, 4]. Fortunately, the constant increase in computational resources and the use of massively parallel machines now make such computations realistic.

Several multi-cycle LES-based computations have been reported in the literature since the review papers of Haworth [20] and Celik *et al.* [5]. Hasse *et al.* [19] performed 13 consecutive cycles of a motored engine using Detached Eddy Simulation (DES). Cycle-to-cycle velocity fluctuations at the spark plug were investigated at the time of ignition. It was shown that the differences in velocity could lead to significant combustion variations when computing the corresponding reacting case. Considering 5 different initial scenarios, Goryntsev *et al.* [14, 15] performed 10 consecutive nonreacting two-phase flow LES cycles for each scenario. It was found that CCV phenomena were directly linked to turbulence and that velocity cyclic variations had a great impact on the fuel-air mixing process. Multi-cycle simulations of fired operating points have also been performed recently [37, 43, 46]. In particular, it was shown in [46] that LES was able to reproduce the experimental trend in terms of CCV, even with only 9 simulated cycles. In this study, the sources of CCV were investigated and the importance of the turbulence generated by the tumble breakdown was highlighted.

However, most authors highlight the lack of experimental data specifically dedicated to the validation of LES [5, 9, 46]. The French project SGEmac has been specially built to validate LES of CCV by acquiring a large experimental database on different operating points of a four-valve spark ignition engine [24]. This database includes motored engine and fired operating points, with low or high levels of CCV. A detailed characterization of the various operating points is achieved with numerous temperature and temporal pressure measurements at several locations of the set-up. Optical diagnostics (Particle Image Velocimetry (PIV), OH Laser Induced Fluorescence (LIF), combustion chemiluminescence) allow also the investigation of the local properties of the flow.

The computational domain includes most of the experimental setup: cylinder, intake and exhaust ducts, intake and exhaust plenums. This strategy has potentially two major drawbacks, its CPU cost since the computational domain is large (~ 2.5 m long) and its modeling cost since some additional devices

Table 1: Characteristics of the SGEmac engine test bench. Crank Angle Degrees (*CAD*) are relative to compression Top-Dead-Center (TDC). The *CAD* of valve openings and closures correspond to experimental residual valve lifts of 0.1 mm.

	Units	Values
Compression ratio	[-]	9.9
Engine speed	[rpm]	1200
Bore	[mm]	82
Stroke	[mm]	83.5
Connecting rod length	[mm]	144
Intake Valve Opening (IVO)	[<i>CAD</i>]	350
Intake Valve Closure (IVC)	[<i>CAD</i>]	-120
Exhaust Valve Opening (EVO)	[<i>CAD</i>]	120
Exhaust Valve Closure (EVC)	[<i>CAD</i>]	-350

(flame-arrestors for example) must be accounted for. But it also offers two great advantages: first, it allows to capture acoustic phenomena in the ducts which are a possible source of CCV [20, 9, 46]; second, it enables a proper definition of intake and exhaust boundary conditions. Indeed, in most studies, boundary conditions are imposed in the intake and exhaust ducts, close to the cylinder [14, 37, 46]. With such a compact domain, several challenging issues need to be tackled such as turbulence injection, back-flow treatment or acoustic wave reflection for instance. With an extended domain, these issues vanish naturally.

In this paper, only a motored engine case is reported. It constitutes an essential validation step before computing more complex operating points with combustion. This operating point is experimentally known to be very stable with low CCV. Therefore, the objective here is not only to discuss cyclic variations but also to prove that the chosen methodology is suitable to describe with high fidelity the engine behavior, from an aerodynamic and acoustic point of view. To ensure a proper statistical sampling of the flow field, 27 consecutive LES cycles are performed.

This paper is organized as follows. The experimental setup and engine settings are recalled in section 2. The LES solver and the models are presented in section 3. Section 4 describes the meshing methodology, the prescription of the boundary conditions and the modeling of the flame-arrestors. Section 5 presents a comparison of the LES results with PIV acquisitions and temporal pressure measurements specifically introduced in the experimental setup. The flow behavior in the intake and exhaust lines is first analyzed before considering the in-cylinder predictions.

2. Experimental setup

The SGEmac engine test bench operated at IFP has been specifically designed to investigate cyclic combustion variability. This single-cylinder is a four-valve, pent-roof, spark ignition engine with a flat piston. The whole setup is displayed in Fig. 1(a) and the main parameters are summarized in Table 1.

The operating points acquired on this bench are documented in [24]. For fired points, the test bench is fueled with gaseous propane while for the non-reactive point the engine is only filled with air. Air

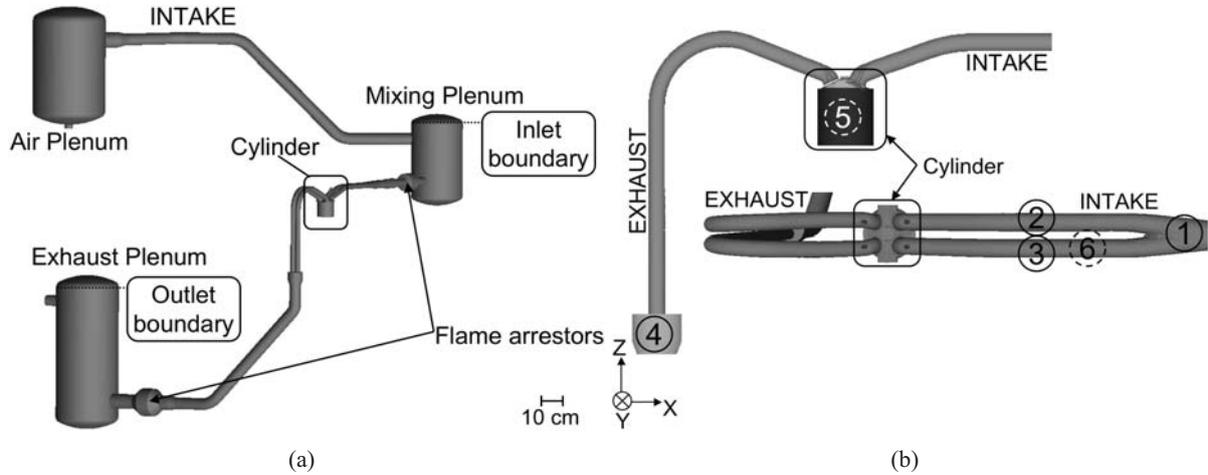


Figure 1: (a) Sketch of the experimental SGEmac engine test bench and locations of the LES boundaries. (b) Location of the experimental measurements: (1,2,3,4) pressure transducers; (5) PIV measurement in a vertical cross-section of the combustion chamber; (6) PIV measurement in a vertical cross-section of one of the intake ports.

and propane flow rates are controlled by sonic nozzles. Air is introduced in a tranquilization plenum and propane is then added in a mixing plenum. At the engine exhaust, gases are tranquilized in a third plenum. Since the engine is operated in a fully premixed mode, a flame-arrestor is added for safety reasons before each plenum (Fig. 1(a)). One hundred experimental consecutive cycles were acquired for each operating point.

Figure 1(b) shows the location of the various experimental acquisitions. PIV measurements are performed through a quartz cylinder and an optically transparent intake duct (planes 5 and 6) providing instantaneous and phase-averaged velocity fields. Several pressure transducers are used to record at one CAD resolution the pressure evolution along the intake (noted 1, 2 and 3) and exhaust ducts (noted 4).

In the literature, different parameters are used to quantify CCV. Variations in Indicated Mean Effective Pressure (IMEP) or in-cylinder peak pressure P_{max} are the most usual indicators of CCV [33, 47]. For the present motored engine case (no combustion), IMEP is not a relevant parameter and thus the variations can only be characterized with the in-cylinder flow field and P_{max} . Experimental measurements have shown that this operating point is very stable in terms of P_{max} with relative variations of about 1%.

3. LES of piston engines flows

LES is performed with a fully compressible Navier-Stokes solver on unstructured grids with a cell-vertex finite-volume formulation [31, 39, 16, 17]. Centered spatial schemes and explicit time-advancement are used to control numerical dissipation and capture acoustics. For the present case, a Lax-Wendroff scheme [25], 2nd order in space and time, is employed with a time step conditioned by the acoustic CFL number.

The LES solver takes into account changes of heat capacity with temperature and composition using tab-

ulated values of heat capacity for each species. The multispecies fluid follows the ideal gas law, $P = \rho r T$ where P is the pressure, ρ is the density, T is the temperature and r is the mixture gas constant. Viscous transport terms are handled using classical gradient approaches. The fluid viscosity and the heat diffusion coefficient follow Sutherland's law and Fourier's law respectively. The species diffusion coefficients are obtained using a species Schmidt number along with Hirschfelder and Curtis approximation and velocity corrections for mass conservation [36].

Filtering the Navier-Stokes equations yields unresolved terms, which need to be modeled. The following closures of the subgrid scale (SGS) terms are used in the LES solver:

- The SGS stress tensor $\overline{\tau_{i,j}}^t$ is closed using a Boussinesq approximation. This approximation introduces a turbulent viscosity ν_T which is estimated with the standard Smagorinsky model [42] with a constant $C_S = 0.18$.
- The SGS species fluxes $\overline{J_i^k}^t$ are modeled using a species SGS turbulent diffusivity $D_k^t = \nu_T / Sc_k^t$, where Sc_k^t is the turbulent Schmidt number ($Sc_k^t = 0.6$ for all species k).
- The SGS energy flux $\overline{q_i}^t$ is modeled using the SGS turbulent thermal conductivity $\lambda_{th}^t = \rho \nu_T C_p / Pr^t$ with C_p the heat capacity at constant pressure of the mixture and Pr^t the turbulent Prandtl number ($Pr^t = 0.6$).

The methodology of Cook and Cabot [8] is used to treat shocks by introducing a hyper-viscosity in the viscous stress tensor which thickens the shock front. Such shocks can appear at moments where exhaust valves are opened.

The boundary condition treatment is based on a multi-species extension [31] of the Navier-Stokes Characteristic Boundary Conditions (NSCBC) [35].

4. Numerical Setup

Acoustics are a potential source of CCV and must be captured by LES. In the project SGEmac, two methodologies are explored [24]. The first considers the coupling of a system simulation (1D) and LES (3D), where the 3D simulation is only applied on the combustion chamber and a part of the intake and exhaust pipes. The present scope of this paper concerns the second methodology which consists in applying LES on most of the experimental setup. Figure 1(a) shows the computational domain. The computed intake line extends from the mixing plenum to the cylinder while the exhaust line is fully computed. The two flame-arrestors are accounted for. The air plenum and the line between the two intake plenums have been removed since it is expected that most of the acoustic activity takes place between the cylinder and the mixing plenum.

This configuration allows a simple and unambiguous definition of the boundary conditions (two plenum conditions). The following subsections detail the key points of the methodology used in this work.

4.1. Mesh management

The whole computation domain is meshed using tetrahedra: it covers about 2.5 m from the intake boundary condition to the exhaust boundary condition and includes two plenums of 20 l (intake) and 50 l

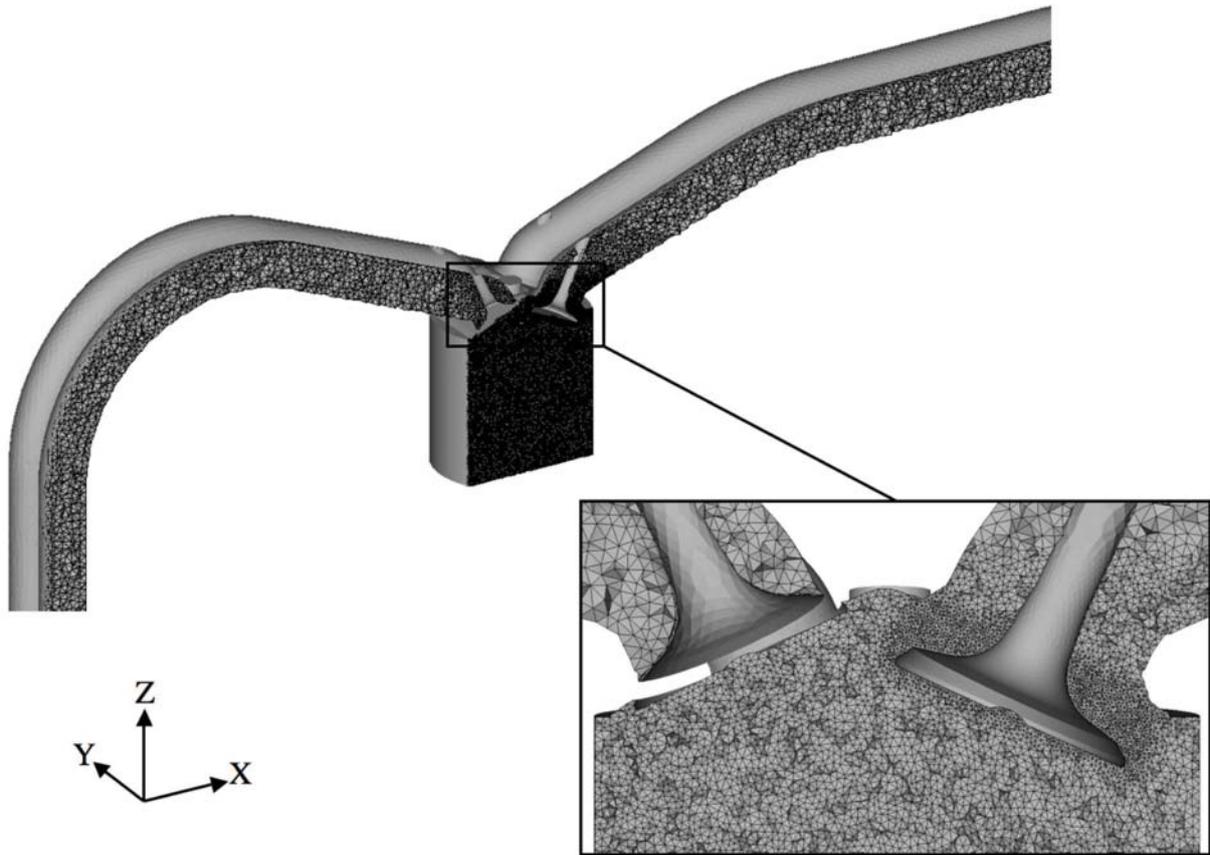


Figure 2: View of a typical tetrahedral mesh during the intake stroke.

(exhaust).

In the present study, an engine cycle is divided into 41 phases (i.e. 41 grids) in order to maintain the quality of the mesh throughout the cycle. Between two computation phases, a second-order interpolation is used. The grids of each phase are generated before the simulation using a two-staged smoothing approach (Laplacian and optimization-based smoothing) [12]. As a reference, recent and comparable LES of IC engine used 20 phases with hexahedral-based grids [37, 46] and 35 phases with hybrid tetrahedral/prismatic-based grids [19]. This method allows to avoid distortions of tetrahedra and to preserve accuracy and stability [46].

The smallest mesh contains 2.2 million cells at top-dead-center (TDC) while 9.6 million cells are required for the biggest mesh at bottom-dead-center (BDC). The characteristic cell size into the cylinder is of the order of 0.8 mm . The meshes are specifically refined around the valve seats, with a minimum of seven cells within a residual valve lift of approximately 0.35 mm . From the intake/exhaust ports to the plenums, the meshes are gradually derefined with a biggest characteristic cell size in the plenums of about 20 mm . Note that meshes are not refined at the walls since a law-of-the-wall formulation is used [39]. Figure 2 shows an overview of a typical tetrahedral mesh during the intake stroke.

4.2. Boundary conditions

At the top of the intake and exhaust plenums, a pressure imposed boundary condition is set. The target pressures are not constant but time-varying plenum signals extracted from the experimental data which change between 4.35×10^4 and 4.5×10^4 Pa for the inlet plenum and 9.9×10^4 to 1.019×10^5 Pa for the outlet plenum. These signals are quasi sinusoidal with a frequency dictated by the engine rotational speed. As mentioned in the introduction, usual IC engine simulations consider boundary conditions directly in the ducts, close to the cylinder. Compared to a plenum signal, signals measured in the ducts (i.e. closer to the cylinder) vary much more and contain a wider spectrum of scales with many high frequencies: including the exhaust and intake ducts and imposing pressure in the plenums is obviously making the simulation easier.

Now, even if a larger computational domain makes the simulation simpler, it does not solve all boundary condition problems because acoustic impedances at inlets and outlets must be controlled: a section where pressure is strictly imposed is fully reflective for acoustic waves propagating in the LES while it is not necessarily so in the experiment. There is no easy solution to this difficulty. The best one is to locate boundary conditions as far as possible from the engine in places where pressure is really constant. Here, quasi nonreflective NSCBC are used via a Linear Relaxation Method (LRM) [38, 35] to impose pressure in the two plenums. LRM boundary conditions are well known to act as first order low-pass filters introducing a cut-off frequency that separates waves that will be reflected from the ones that will leave the domain [40]. This cut-off frequency is directly proportional to the relaxation coefficient imposed on the target pressure signal. Thus, one of the main advantages of a plenum boundary condition compared to a duct boundary condition is to allow the use of lower relaxation coefficients since the imposed signal varies much less and contains lower frequencies. As a consequence, the plenum boundary condition will be acoustically less reflective.

However, the introduction of a low relaxation coefficient can deteriorate the target signal, both in magnitude and in phase. In other words, the pressure signal which is actually recovered in the computation may differ from the target signal imposed in the plenums. For the range of relaxation coefficients used in this study, preliminary tests have shown that the LRM induces a negligible damping in magnitude. However, it leads to a phase shift between the target pressure (measured experimentally) and the inlet pressure obtained in the LES. This problem can be solved by shifting the target pressure in time as follows: for a signal composed of a single frequency f , Selle *et al.* [40] have demonstrated that the phase shift Φ introduced by the reflexion coefficient \mathbf{A} of a characteristic boundary condition with a relaxation coefficient K can be estimated by:

$$\Phi = \arctan \left(\frac{\text{Im}(\mathbf{A})}{\text{Re}(\mathbf{A})} \right) \quad \text{with} \quad \mathbf{A} = -\frac{1}{1 - i\frac{2\pi f}{K}} \quad (1)$$

Knowing Φ , it is then possible to deduce the corresponding temporal shift Δt to impose on the initial target signal in order to obtain, after application of the LRM, the right desired signal:

$$\Delta t = \Phi / (2\pi f) \quad (2)$$

A similar methodology was extended to the multi-frequency pressure signals of the intake and exhaust boundary conditions. Figure 3 presents the results for the intake boundary condition. In this case, the shift induced by the relaxation coefficient (Eqs. 1 and 2) is evaluated to -0.0417 s i.e. -50 CAD. The

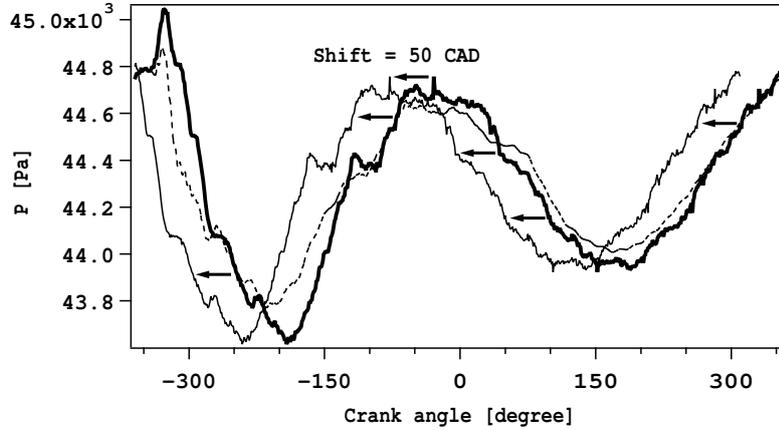


Figure 3: Pressure signals at the intake boundary condition. Experimental signal (—), shifted target signal imposed in the computation (—), signal recovered after imposition of the quasi non reflective NSCBC (---).

experimental pressure signal has then been shifted by -50 CAD and specified as target signal in the computation. The resulting inlet pressure in the LES, after applying boundary condition corrections, matches the experimental signal correctly. Thus this methodology allows to obtain acoustically well-defined boundary conditions while preventing any drift of the imposed signal. In addition, this boundary condition can take into account the acoustics in the ducts which is a possible source of CCV.

4.3. Modeling of the flame-arrestors

The flame-arrestors were introduced in the experiment for obvious security reasons, but from the computational point of view they represent an additional difficulty. Preliminary experimental studies of the flame-arrestor have been performed on an acoustic test bench [45]. They have shown that acoustic in the ducts is strongly perturbed by the presence of these flame-arrestors indicating that they must be included in the numerical setup. The flame-arrestors are spiral wound corrugated metal sheets which result in several hundred channels of diameter $d = 0.5$ mm (Fig. 4(a)). Obviously such holes cannot be meshed. The solution adopted in this work is to model the flame-arrestor by two disjoint domains linked by a coupled suction/injection boundary condition (Fig. 4(b)). The equivalent flame-arrestor is characterized by a thickness $h = 20$ mm (the distance between the two coupled boundary conditions) and a porosity $\sigma = 0.68$. The pressure drop ΔP in the device is then given by the discharge law equation proposed by Mendez and Eldredge [28] originally developed for multi-perforated plates typically found in aeronautical combustion chambers. This model includes a time dependence to the mass flow rate which allows the condition to properly reproduce the acoustic properties of the holes:

$$\Delta P = \frac{\rho l'}{\sigma \sin(\alpha)} \frac{\partial U_W}{\partial t} + \frac{1}{2C_D^2 \rho} \frac{U_W^2}{\sigma^2 \sin^2(\alpha)} \quad (3)$$

where $l' = \frac{\pi d}{4} + h$ is a characteristic length determined to match the Howe model [10], U_W is the bulk velocity and α is the inclination angle of the aperture. In this expression, the discharge coefficient C_D depends on the bulk velocity U_W (given by the manufacturer).

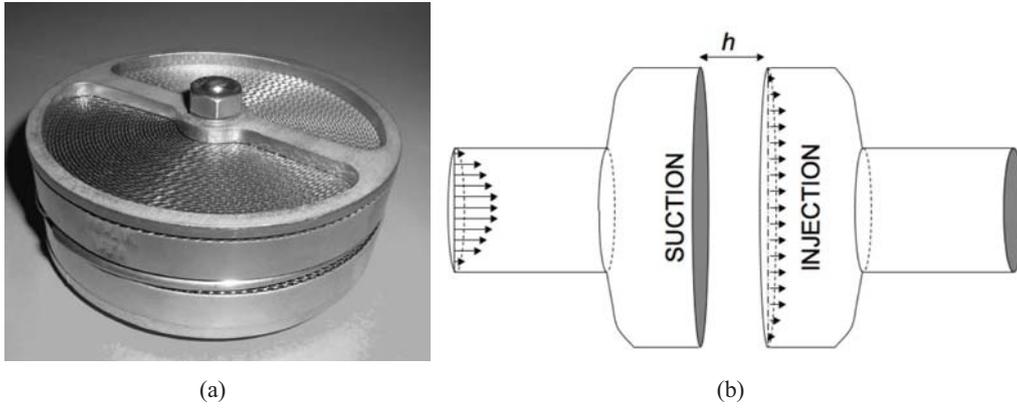


Figure 4: Flame-arrestor: (a) in the experiment; (b) in the computation.

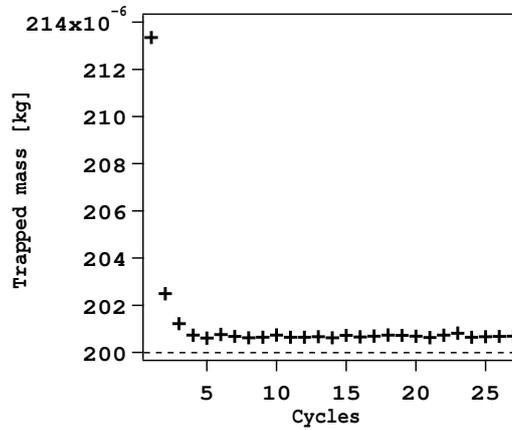


Figure 5: Evolution of the trapped mass in the cylinder for the 27 LES cycles. The experimental trapped mass (---) is estimated to 199.9 mg.

5. Results and Discussion

The whole simulation covers 27 consecutive cycles. Computation starts at IVO with a flow at rest. The turnaround time of a single LES cycle is about 18 hours on 400 processors of a SGI Altix ICE 8200 cluster. Figure 5 presents the evolution of the trapped mass for the 27 consecutive LES cycles. The first two cycles are strongly influenced by the initialization of the simulation and are discarded in the following analysis. Thus, 25 cycles remain for the comparison with the experimental data. The 25 remaining LES cycles are very stable in terms of trapped mass around 200.6 mg. The difference compared to the value estimated in the experiment (199.9 mg) is approximately 0.5%.

The validation of the multi-cycle LES is organized as follows:

- First, the flow field activity in the ducts is validated using PIV measurements (plane 6 in Fig. 1(b))

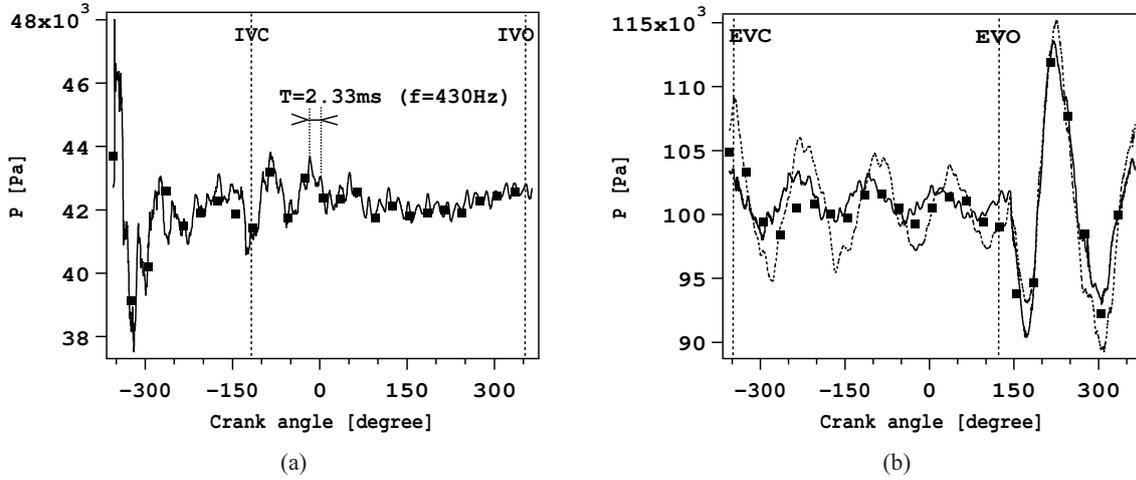


Figure 6: Phase-averaged mean pressure in the intake (a) and exhaust (b) manifolds, measurement noted 1 and 4 respectively in Fig. 1(b). LES:—; experiments: ■. LES results without modeling of the flame-arrestors (---) are also shown for the exhaust manifold.

and temporal pressure acquisitions (probes 1 and 4 in Fig. 1(b)) in the intake and exhaust manifolds. Acoustic wave propagation in the intake and exhaust ducts is specifically investigated.

- Second, the LES quality inside the cylinder is assessed and the flow behavior is compared to the experimental data in terms of in-cylinder pressure and aerodynamic field throughout the cycle. CCV are highlighted and analyzed.

5.1. Flow behavior in the intake and exhaust ducts

Figure 6 shows the pressure evolution during the whole cycle at the intake and exhaust manifolds (probes 1 and 4 respectively in Fig 1(b)) and the good agreement between phase-averaged LES and experimental signals. The two signals exhibit the same progressive damping when the valves are closed (between IVC and IVO for the intake duct and between EVC and EVO for the exhaust duct, see Table 1). The fact that LES and experimental signals match very well during the whole cycle shows that the modeling described in Section 4.3 is able to reproduce the right impedance of the flame-arrestors. The signal extracted from a simulation without flame-arrestor (also reported in Fig. 6 (right) for the exhaust line) shows that the main effect of the flame-arrestor is to damp the oscillations, the phase of the signal being little affected. The same behavior may be observed for the intake line. Despite this satisfactory global behavior, the LES signal in the intake duct shows a superimposed high frequency signal around 430 Hz which is not present in the measurements.

To determine the nature of the 430 Hz frequency appearing in the LES pressure signal, two diagnostics were used: a spectral analysis of the LES results via a spectral map and an acoustic analysis of the configuration via a Helmholtz solver. The spectral map consists in FFT analysis applied on multiple pressure probes recorded on the centerline of the intake duct. The sample frequency of the pressure signals is 100 kHz and the spectral resolution of the FFTs is 0.4 Hz since 25 LES cycles are recorded

Table 2: Longitudinal mode frequencies predicted by the Helmholtz solver and by the LES for the intake line.

Mode number	name	location	Frequency [Hz]	
			Helmholtz solver	LES
1	1/4 wave	full intake line	108	110
2	1/4 wave	from valves to manifold	234	-
3	3/4 wave	full intake line	251	250
4	5/4 wave	full intake line	405	430

corresponding to a total physical time of 2.5 *s*. The spectral map of the LES pressure signals reveals a very wide spectrum with many characteristic frequencies, going (for the most energetic ones) from 10 *Hz*, the frequency of the valve opening, to 630 *Hz*. The structure of the 430 *Hz* mode is shown in Fig. 7 (top). This mode is an acoustic eigenmode of the intake duct and this can be checked by using an acoustic Helmholtz solver [32]. This code (called AVSP) solves the eigenvalue problem associated to the Helmholtz equation which solves the wave equation in a flow:

$$\nabla \cdot (c^2 \nabla \hat{p}) + \omega^2 \hat{p} = 0 \quad (4)$$

where c is the local speed of sound and \hat{p} is the Fourier transform of the pressure fluctuations at the radial frequency $\omega = 2\pi f$. This solver has been applied to the intake line with the valves closed since AVSP is not able to take into account moving boundaries. The results in Table 2 show that four main longitudinal acoustic modes coexist in the intake line. The modes 1, 3 and 4 are respectively the quarter wave, three-quarter wave and five-quarter wave modes of the full line. The mode 2 is the quarter wave mode between the valves and the intake manifold and it is damped in the LES. The analysis of the spatial structure of the five-quarter wave mode at 405 *Hz* (Fig. 7 bottom) shows that the correspondence with the 430 *Hz* mode found in the LES is excellent. The slight shift of frequency and of spatial structure is certainly due to the fact that the spectral map is built over the whole cycle, i.e. valves opened and closed, contrary to the acoustic configuration. This result confirms that this 430 *Hz* LES mode is a real mode of acoustic nature and not a hydrodynamic effect or a numerical artifact. Of course, the AVSP result cannot explain why this acoustic mode is damped in the experiment and not in the computation. Experimental measurements made without flame-arrestors have shown that they are not the source of damping. This point must still be explored but the agreement between LES and experiment in Fig. 6 remains excellent anyway.

Figure 8 compares the phase-averaged crank-resolved pressure obtained in the LES to the experimental measurements at probe 3. The corresponding phase-averaged axial velocity is also shown. Experimental velocity values are extracted from PIV measurements on the centerline of the duct. Negative velocities indicate a fluid flowing from the plenum to the cylinder. LES and experiments are in good agreement during the whole cycle, both for the pressure and the velocity. The strong back-flow occurring at IVO ($CA = -360^\circ$) is clearly visible. This phenomenon is not localized close to the cylinder only. During about 20 *CAD* the complete intake line flows back to the plenum. Thereafter, the flow enters the cylinder until a second minor back-flow occurs again just before IVC ($CA = -170^\circ$). When the valves are closed at $CA = -120^\circ$, the flow continues to oscillate between the intake ports and the plenum. The

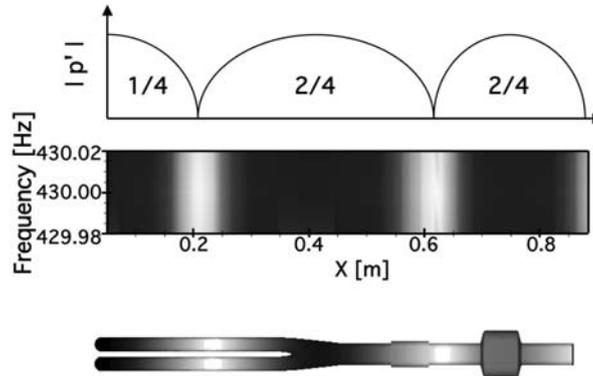


Figure 7: Spatial structure of the five-quarter wave longitudinal mode in the intake ducts. Comparison of the field of $|p'|$ between spectral map on the duct axis (top) and the Helmholtz solver results in the whole intake domain (bottom).

variations from one cycle to another are roughly constant during the whole cycle, of the order of $\pm 2 \text{ m/s}$. It is worth reminding that this behavior corresponds to a probe located on the centerline of the duct. A probe located at the same longitudinal position but shifted in the radial direction exhibits noticeably different evolution. In extreme cases, both positive and negative velocities may be found in a given section of the duct as shown in Fig. 9. This complex evolution of the velocity, rapidly varying from negative to positive values both in space and in time, confirms how challenging it would be to set a boundary condition in section 3 (Fig. 1(a)) because it is too close to the engine. At this section, the flow changes sign with time and is not homogeneous in space. Considering Fig. 9, the simple question of defining if the boundary condition should be an inlet or an outlet is already a difficult task. Moreover, it has to be noted that all hot gases flowing back to the intake boundary condition are "lost" for the computation since the boundary condition is generally built only to feed cold fresh gases into the domain. This is not very problematic for a motored engine computation where all gases have a quasi constant composition and temperature but it may become an important source of errors for reacting cases where gases leaving the engine strongly differ from fresh gases feeding it.

5.2. In-cylinder predictions

Flow characteristics

Figure 10 shows instantaneous velocity fields obtained by LES at four distinct times. These fields exhibit the typical structures encountered during the intake, compression and exhaust strokes. At IVO, a back-flow first occurs due to the lower pressure within the intake pipe. Then, after about 20 CAD, fresh gases start entering the cylinder. The annular valve jets interact with the cylinder head and the piston to form smaller structures (Fig. 10(a)). At higher valve lifts (Fig. 10(b)), the jet direction coupled to the piston movement induces a well-known tumbling motion in the cylinder. During compression, the tumble motion becomes more and more structured until TDC as illustrated in Fig. 10(c). This organized motion disappears during the expansion stroke. The exhaust stroke also begins with a back-flow from the exhaust pipe into the cylinder. Due to the very small valve lift, the flow is sonic around the valve heads (Fig. 10(d)). At higher exhaust valve lifts, the pressures of the exhaust pipes and the cylinder balance out

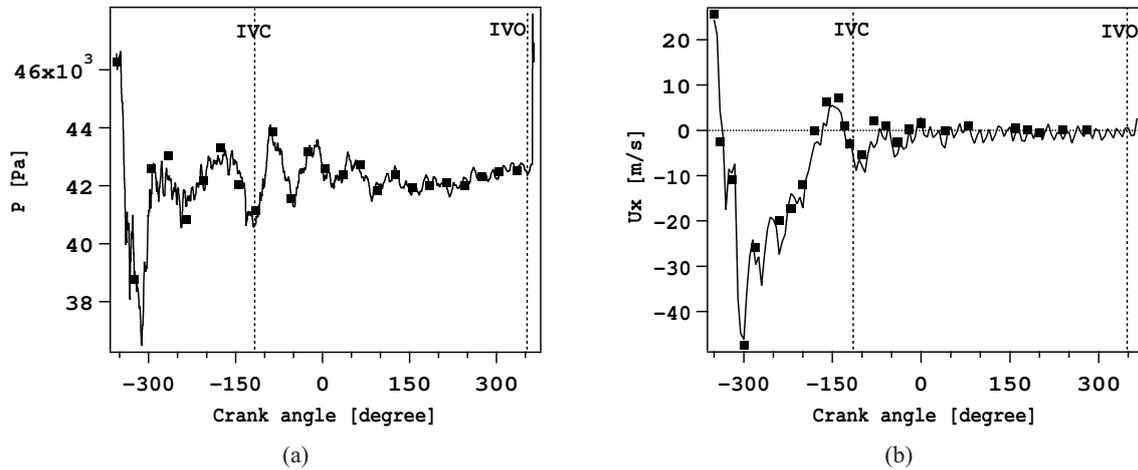


Figure 8: Phase-averaged crank-resolved pressure (a) and velocity (b) in the intake duct, measurements noted 3 and 6 respectively in Fig. 1(b). LES:—; experiments: ■.

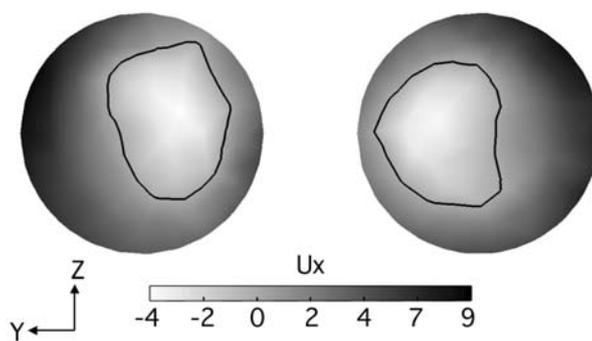


Figure 9: Phase-averaged axial velocity field (LES) in a cutting plane through the intake ducts at 180 CAD before TDC (location 3 in Fig. 1(b)). The isoline of null velocity is also plotted.

and air is driven out by the piston motion.

The evolution of the in-cylinder pressure during the whole cycle is plotted in Fig. 11. Both mean LES cycle and mean experimental cycles are depicted. During the main part of the cycle (Fig. 11(a) and Fig. 11(c)), the mean LES signal is superimposed to the experimental curve. However, during the compression stroke (Fig. 11(b)) LES overpredicts the pressure rise, leading to a higher maximum mean pressure. Afterwards, the LES recovers the experimental curve with a very good agreement. The LES behavior around TDC indicates that the compression ratio used in the simulation differs from the experimental one, certainly because of blowby issues often encountered experimentally with optical engines.

Assessment of quality and reliability of the multi-cycle LES

Before going into more details, the quality and the reliability of the multi-cycle LES has to be assessed. The quality of a LES may be investigated using two categories of estimators: single-computation estimators or grid-model procedures which require several simulations (typically a standard simulation, then a simulation with a modified SGS model, and finally a coarse grid simulation) [22, 6, 23]. In the present study, the efforts in terms of grid meshing and CPU time are too important for considering the second class of indicators. Therefore the quality of the simulation is evaluated by means of the ratio between SGS viscosity ν_T and fluid viscosity ν . Figure 12 displays the evolution of the mean and maximum ratio over the cylinder volume. The mean values are globally low (< 6) during the whole cycle whereas the maximum values do not exceed 20. These results indicate that the set of grids used in the simulation allows a correct resolution of the flow during most of the cycle. The most critical periods in terms of flow resolution are encountered around compression TDC and EVO. Indeed, during the compression stroke, the grid resolution stays almost constant (from 0.8 mm at BDC to 0.65 mm at TDC) while the turbulent scales strongly decrease (typically by a factor of ten [21, 7]), leading to an insufficient resolution around TDC. At EVO, the grid is much more refined (~ 0.07 mm in the valve seats) but the turbulent activity generated by the high speed jets in the valve seats (~ 480 m/s) is too strong to avoid higher levels of turbulent viscosity.

The reliability of the simulation is also controlled by the statistical sampling. In order to compare the LES to the experiments, phase averaging is performed: phase-averaged quantities are obtained using 25 cycles in the LES and 100 cycles in the experiment. Previous studies [30, 9, 44, 18] have already addressed the impact of the number of cycles used for phase averaging. For gauging the relevance of the LES sample size, a convergence analysis was performed first on the experimental data. It consists in evaluating the difference between a phase-averaged velocity over n cycles ($n = 10, 25, 50, 75$) and the reference phase-averaged velocity over 100 cycles. The difference ε_n^{CA} evaluated by Eq. 5 is computed along a vertical velocity profile sketched in Fig. 16(a):

$$\varepsilon_n^{CA} = \frac{1}{\Delta z} \int_{piston}^{cylinder\ head} \left| \frac{\langle \sqrt{U_x^2 + U_z^2} \rangle_n^{CA} - \langle \sqrt{U_x^2 + U_z^2} \rangle_{100}^{CA}}{\langle \sqrt{U_x^2 + U_z^2} \rangle_{100}^{CA}} \right| dz, \quad (5)$$

where $\langle \cdot \rangle_n^{CA}$ is the ensemble averaging over n cycles at a given crank angle CA and Δz is the integration vertical height.

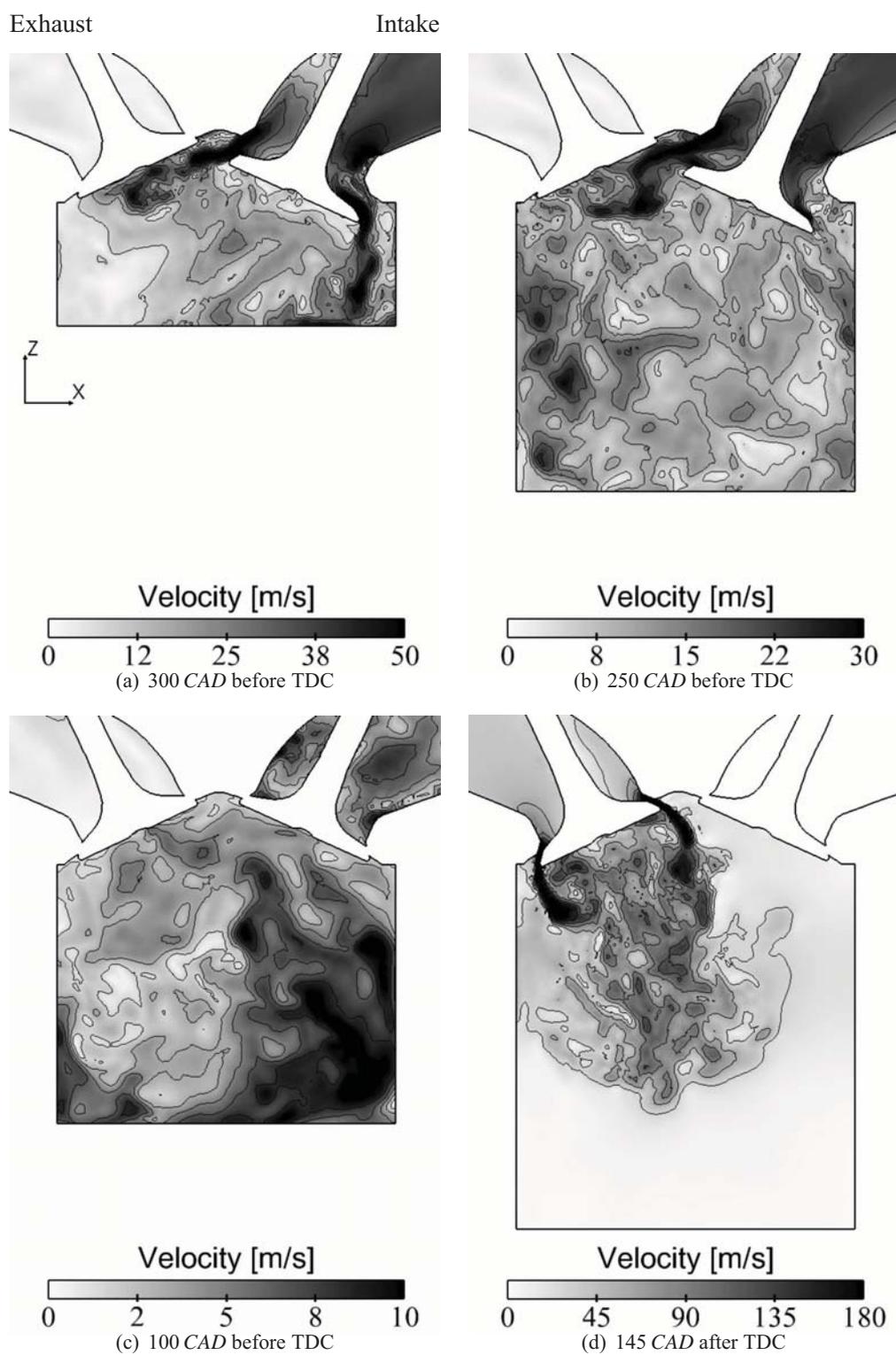
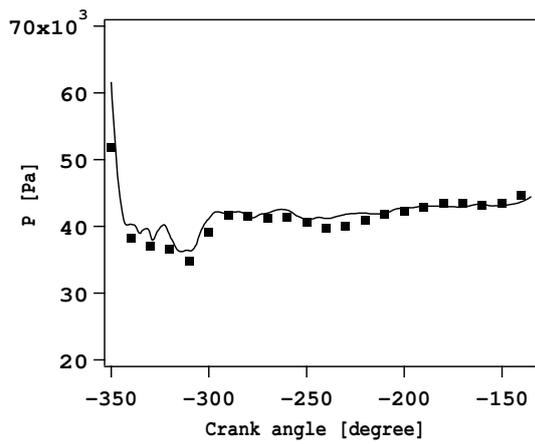
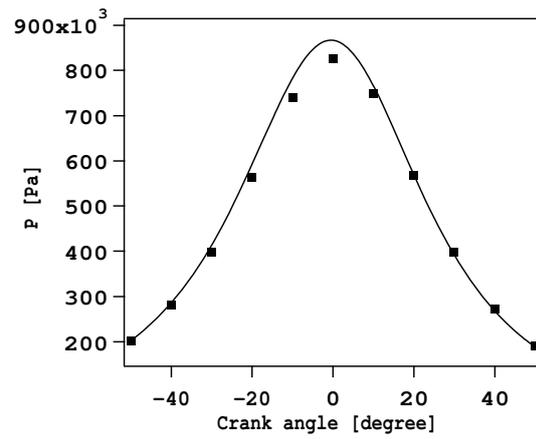


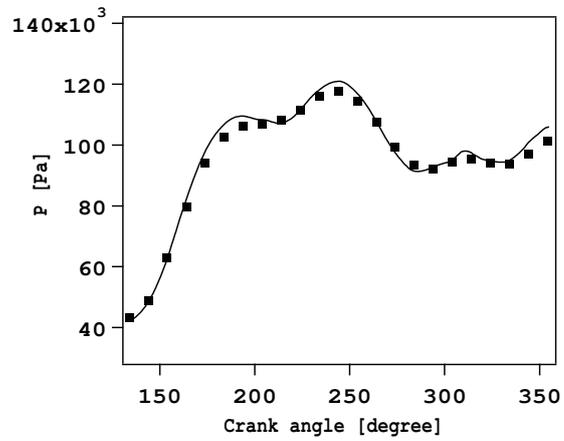
Figure 10: Instantaneous velocity fields (LES) in a vertical cross-section of the 10th cycle.



(a) From the early moments of the cycle to IVC



(b) Compression and expansion strokes



(c) From EVO to the end of the cycle

Figure 11: Evolution of experimental (■) and LES (—) phase-averaged cylinder pressure during the whole cycle.

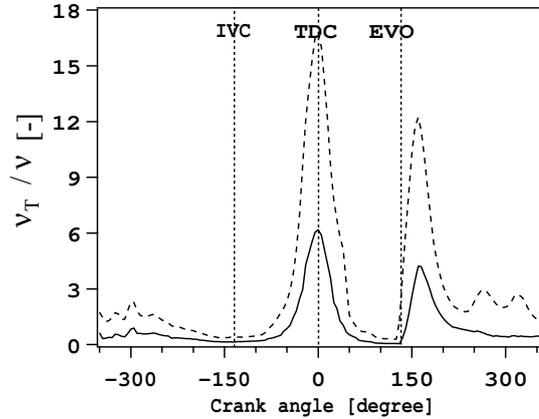


Figure 12: Computed SGS viscosity normalized by fluid viscosity in the cylinder: volume-averaged ratio (—), maximum ratio (---).

Table 3: Convergence analysis on the number of experimental cycles used for ensemble averaging: differences with respect to reference quantities averaged over 100 cycles.

CAD before	Mean velocity				RMS of velocity			
	ϵ_{10}	ϵ_{25}	ϵ_{50}	ϵ_{75}	ϵ_{10}	ϵ_{25}	ϵ_{50}	ϵ_{75}
TDC	%	%	%	%	%	%	%	%
280	9.7	5.5	3.9	3	22.4	17.7	11.4	5.2
240	8.4	6.2	2.3	1.7	16.4	9.3	5.2	1.9
180	15	6.4	4.7	2.3	19.9	9.7	7.1	4.4
100	17	5.6	3.6	1.3	20	12	7	2.3

Table 3 shows the error ϵ_n^{CA} at four instants of the intake and compression strokes. It suggests that $n = 25$ is sufficient to evaluate the mean in-cylinder dynamics since the experiment shows a difference of about 6% between a phase-averaging over 25 cycles and a phase-averaging over 100 cycles. A similar study was carried out for the root mean square (RMS) of the velocity. Table 3 indicates that a minimum of 50 cycles would be necessary to obtain an error of 10% on RMS velocities, thus confirming the hypothesis of Heywood [21] or Celik *et al.* [4] for example. It is worth noting that 25 cycles allow an acceptable estimate of the RMS values nonetheless ($\sim 10\%$ error except in the early times after valve opening).

The same analysis can be then done for LES results but only on 25 cycles. Table 4 shows that computing 10 cycles only (as done by several authors [9, 46, 19]) allows a reasonable analysis of the mean flow. Conversely and as expected, this is insufficient for RMS quantities considering that the reference values obtained with 25 cycles are already a limited estimation of the real values.

It has to be mentioned that this analysis is of course restricted to an aerodynamic point of view since the configuration is a motored engine case. For fired operating points, the same kind of analysis could be carried out with combustion indicators like the flame surface or heat release fields. If the

Table 4: Convergence analysis on the number of LES cycles used for ensemble averaging: differences with respect to reference quantities averaged over 25 cycles.

CAD before TDC	Mean velocity				RMS of velocity			
	ϵ_5 %	ϵ_{10} %	ϵ_{15} %	ϵ_{20} %	ϵ_5 %	ϵ_{10} %	ϵ_{15} %	ϵ_{20} %
280	23.4	13.8	6.5	3.5	47.4	24.2	13.2	6.9
240	17.5	7.4	5.2	2.2	38.8	20.5	11.4	5.3
180	13.3	6.1	5	4.3	49.1	17.5	8.5	8.1
100	9.6	6.4	5.1	3.7	58.4	26.1	12.7	6.5

same conclusions are probably valid for stable and weakly unstable operating points, one can expect a noticeably different conclusion for highly unstable cases. (i.e. a much larger statistical sampling would be necessary).

In-cylinder flow field

Figures 13 and 14 compare the measured data to the computed phase-averaged axial and vertical velocity fields in the median plane of the cylinder (plane 5 in Fig. 1(b)) at four distinct times. The axial velocity fields are more representative of the flow motion induced by the valves whereas the vertical component is more representative of the movement of the piston. Note that the window of PIV measurement (Fig.1(b)) has been reduced to exclude zones where laser reflections or leaking oil issues were encountered in the near wall region. In the remaining window, the LES mean axial velocity component is in good agreement with the experimental data. The global shape and the level of velocities measured by PIV are well reproduced by LES. Nevertheless, discrepancies are observed, especially at 280 CAD before TDC. For the mean vertical velocity component, the discrepancies are slightly larger. On the right side of the chamber, the valve jet does not penetrate in the LES as far as in the experiment (Figs. 14(b) and 14(c)), resulting in a different jet/tumble interaction in the upper part of the chamber. However, the overall comparison of the flow structure remains rather good.

5.3. Cycle-to-cycle analysis

In this section, the emphasis is put on the CCV analysis of pressure and velocity variations in the cylinder: CCV are usually studied in terms of maximum cylinder pressure but this quantity gives only a global overview of the engine stability. The study of velocity CCV allows a more precise and local characterization of the flow unsteadiness.

Pressure variations

Figure 15 presents the return map of the maximum in-cylinder pressure. This consists in plotting the maximum pressure of cycle $i + 1$ (normalized by the maximum pressure of the mean cycle) versus

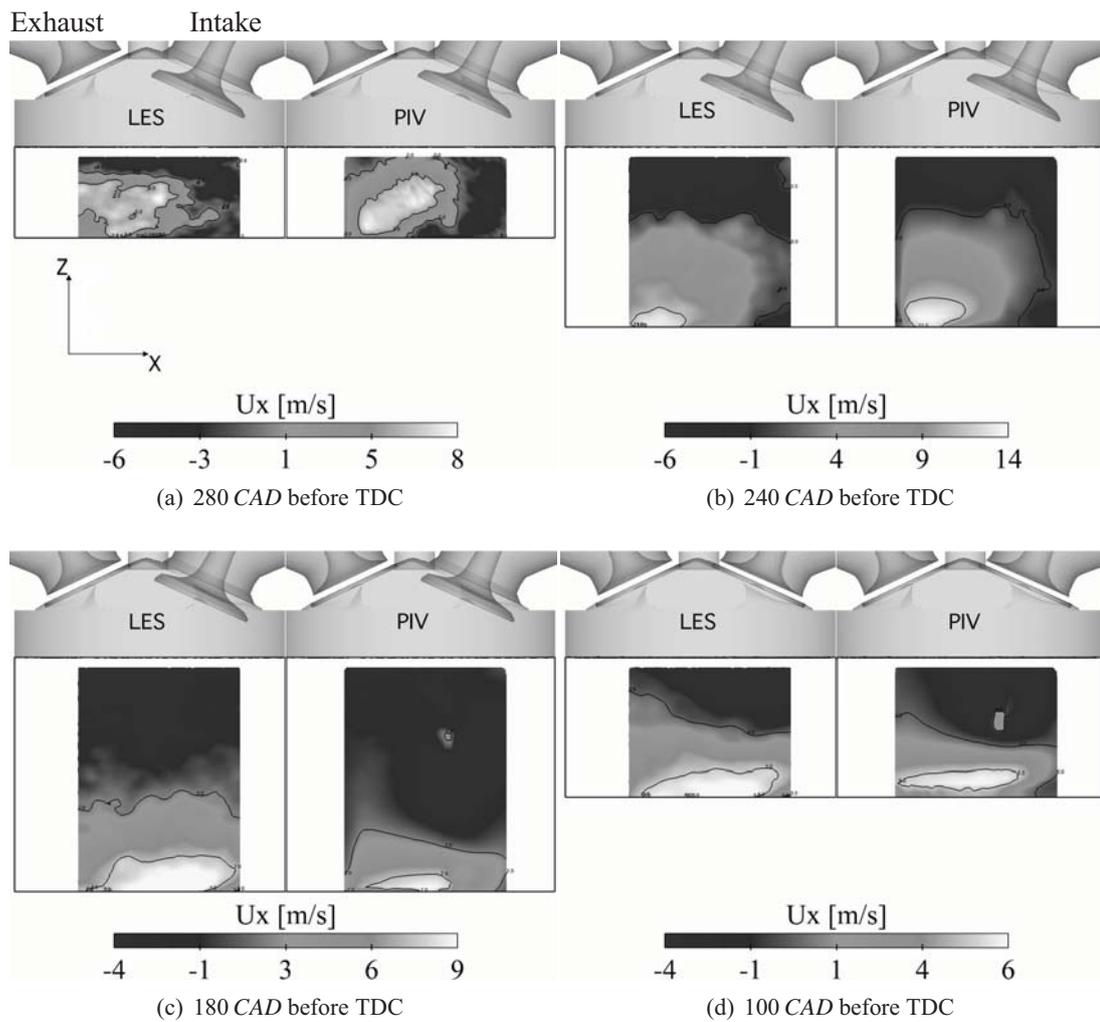


Figure 13: Comparison of LES (left) and PIV (right) results for the phase-averaged axial velocity component (measurement noted 5 in Fig. 1(b)) at four instants.

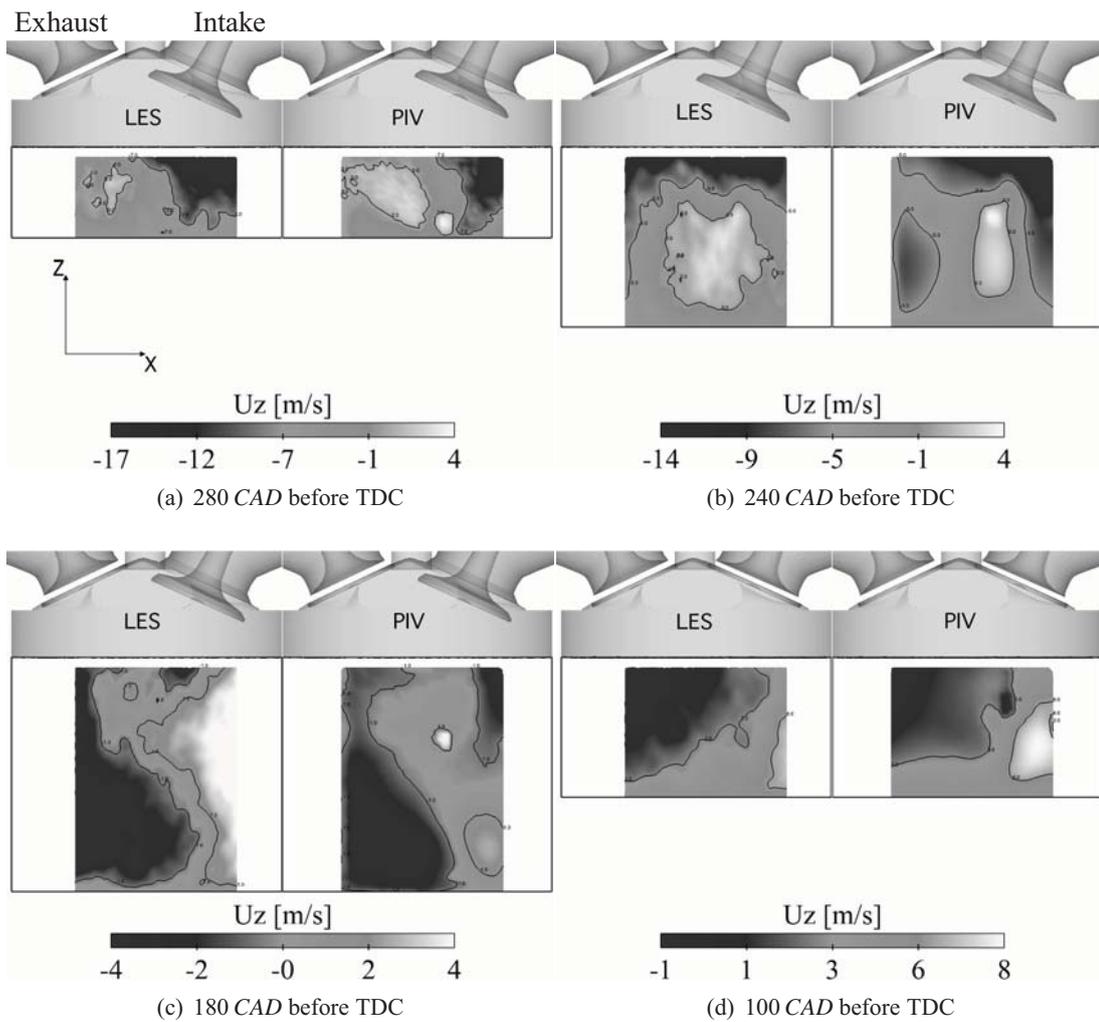


Figure 14: Comparison of LES (left) and PIV (right) results for the phase-averaged vertical velocity component (measurement noted 5 in Fig. 1(b)) at four instants.

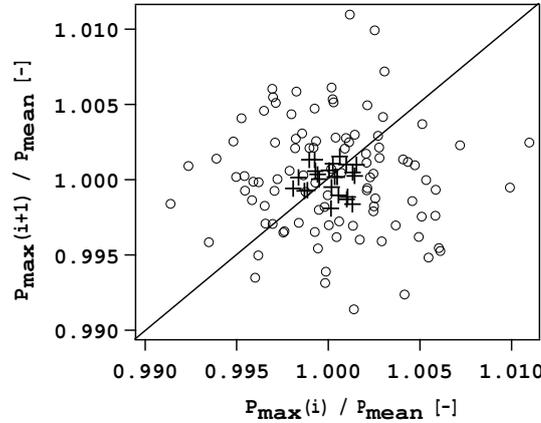


Figure 15: Maximum in-cylinder pressure of cycle $i + 1$ (normalized by the maximum in-cylinder pressure of the mean cycle) versus the maximum in-cylinder pressure of the preceding cycle i ; comparison between experimental (\circ) and LES ($+$) results.

the maximum pressure of the preceding cycle i . The level of CCV in the cylinder pressure is very low for both LES and experiment (relative variation $< 0.4\%$), meaning that LES correctly reproduces the stability of the experimental point. One can observe that neither LES nor experiment exhibit a regular pattern meaning that no obvious relation exists between a cycle and the following one. However, little less CCV are observed in the LES compared to the experiments. Contrary to the experiment where the pressure signal at the plenum slightly varies from cycle to cycle, the same signal is imposed in the LES for all cycles. Tests are currently underway to check if this simplification could modify the results in terms of cyclic variations. The difference in sampling size could be another reason for these discrepancies. Finally, the use of a relatively low-order numerical scheme combined with a Smagorinsky model known to be dissipative may also lead to an excessive dissipation that could reduce CCV.

Aerodynamics variations

Even if pressure CCV are very low, CCV can be significant for the in-cylinder flow field. To illustrate this point, Fig. 16 shows CCV in the axial velocity at different crank angles. The axial velocity component is plotted along the z -axis in the center of the cylinder. For the sake of clarity, the 100 experimental cycles are not superimposed and only a confidence envelope is plotted. The lower and upper part of the confidence envelope contains 95% of the experimental cycles and are estimated as $\langle Ux \rangle_{100} - 2 \cdot \sigma_{Ux}$ and $\langle Ux \rangle_{100} + 2 \cdot \sigma_{Ux}$ respectively, with σ_{Ux} the standard deviation of the axial velocity.

Fig 16(b) shows that CCV levels are slightly higher in the upper region of the profiles during the first times of the intake stroke, due to valve jets. During compression, Fig. 16(d) and (e) show that the variations are homogeneous over the entire height of the chamber with lower levels than during the intake stroke. However, a normalization by the mean velocity reveals that the relative intensity of the variations is stronger during the compression stroke, as already shown by Goryntsev *et al.* [14]. The comparison between the computed instantaneous cycles and the confidence envelope is satisfactory during the whole

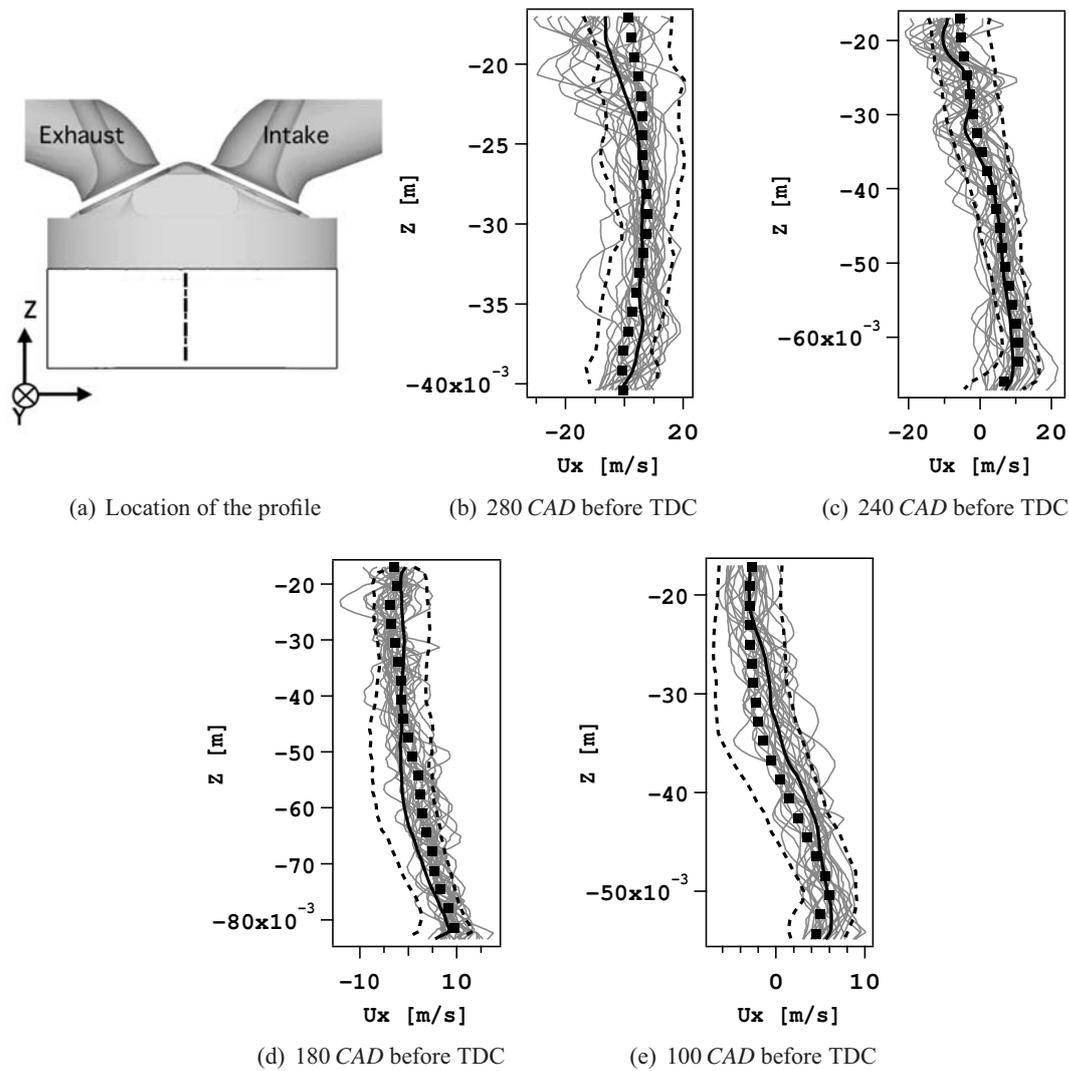


Figure 16: The dashed line in (a) represents the line along which all of the profiles are plotted. (b)-(e) Comparison of axial velocity component profiles between the 25 instantaneous LES cycles (—), the mean LES (—), the mean experiment (■) and the 95% confidence envelope of the 100 instantaneous experimental cycles (---).

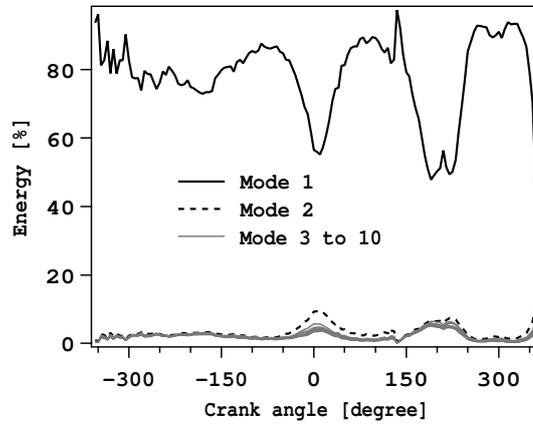


Figure 17: Energy distribution of the first 10 most energetic POD modes.

cycle, especially during the intake stroke, meaning that LES is able to capture the variations of the in-cylinder dynamic.

To determine precisely where aerodynamic CCV occur during a cycle, a proper orthogonal decomposition (POD) [26] analysis of the in-cylinder velocity field is carried out using the snapshot method introduced by Sirovich [41]. To take into account the deformation during a cycle, a phase-dependent POD is performed every 5 CAD [11]. Figure 17 presents the energy distribution of the ten highest energy modes found in the POD as a function of the CA. The largest part of the energy ($\sim 70\%$) is contained in the first mode which corresponds to the mean flow (similar results were found in [1]). The other modes reveal the velocity fluctuations and their corresponding energy denotes their level. In other words, at a considered CA, POD allows an energetic classification of the CCV of the in-cylinder dynamic. The ratio between energies of the first and second mode suggests that CCV are very low during the intake stroke ($\sim 3\%$) and become stronger during the compression with a maximum value near TDC ($\sim 9.5\%$) due to the vortex breakdown and near BDC of the expansion stroke ($\sim 7.5\%$). This result is thus consistent with the previous analysis for velocity profiles.

Figure 18 presents iso-surfaces of the most and second most energetic POD modes found inside the cylinder. It shows that CCV at 280 CAD before TDC are mainly created in the mid-plane of the cylinder by the shear between the valve jets. Then the flapping of the jets becomes the main source of variation as illustrated in Fig. 18(b).

At 180 CAD before TDC, the location of the most energetic mode completely changes. Indeed, at this crank angle the tumbling motion becomes the most energetic mode instead of the intake jets. During the compression stroke, Fig. 18(d) shows that variations are provided by the wall/tumble interaction and some variations are also concentrated in the center of the cylinder, which may be related to a tumble core precession [27, 3].

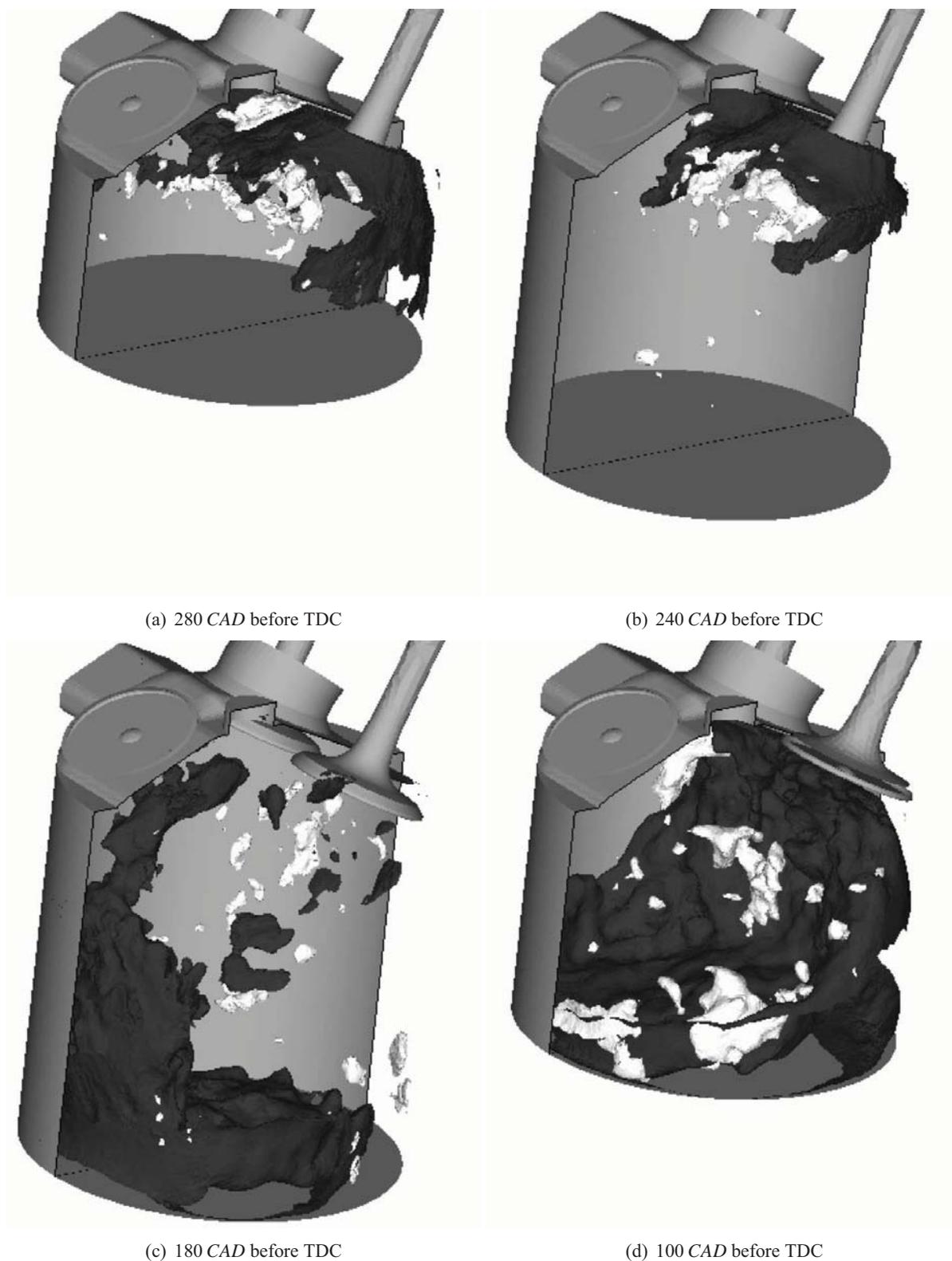


Figure 18: Iso-surfaces of eigenfunctions of the POD first (black) and second (white) most energetic modes.

6. Conclusion

This paper presents a methodology designed to study CCV (Cycle-to-Cycle Variations) in IC engines using multi-cycle LES. In order to limit the influence of the boundary conditions and to ensure proper acoustic resolution, the computational domain takes into account almost the whole experimental bench including intake and exhaust ducts and plenums. The numerical strategy includes mesh movement of tetrahedral elements, modeling of the flame-arrestors and specific treatments of boundary conditions at inlet and exhaust. The methodology is tested on a nonreacting stable operating point with low CCV and compared to experimental results. 27 consecutive LES cycles are computed but only 25 cycles are considered for the analysis. Very reasonable turnaround time is achieved since only 18 hours (elapsed time) are necessary to compute a single cycle. Acoustic activity in intake and exhaust ducts is validated against both pressure transducer measurements and a Helmholtz solver. The flow dynamic in the cylinder is well reproduced by LES with levels of CCV comparable to the experiments. The highest absolute variations are found during the intake stroke but a normalization by the mean flow reveals that the maximum relative variations rather occur during the compression stroke. This report is confirmed by a proper orthogonal decomposition analysis that spatially locates the dynamic variations and denotes their corresponding energy. The high levels of dynamic CCV have little impact on the evolution of the cylinder pressure. The variations in maximum pressure are indeed very low both in the LES and in the experiments. The stable nature of the operating point is thus well reproduced by the simulation. The next step is to apply this methodology for fired operating points with higher CCV levels. The ability of LES to predict both stable and unstable points and their corresponding CCV will be analyzed in future publications.

Acknowledgements

The authors gratefully acknowledge the financial support provided by PSA Peugeot Citroën and Renault SAS in the framework of thesis researches. This work was granted access to the HPC resources of CINES (Centre Informatique National de l'Enseignement Supérieur) under the allocation 2009-c2009026055 made by GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif). The authors also acknowledge the financial support by ANR (Agence Nationale de la Recherche) under grant N.ANR-06-PDIT-007-01 SGE mac.

References

- [1] Baby, X., Dupont, A., Ahmed, A., Deslandes, W., Charnay, G., Michard, M.: A new methodology to analyse cycle-to-cycle aerodynamic variations. SAE Paper (2002-01-2837) (2002)
- [2] Boileau, M., Staffelbach, G., Cuenot, B., Poinso, T., Bérat, C.: LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame* **154**(1-2), 2–22 (2008)
- [3] Borée, J., Maurel, S., Bazile, R.: Disruption of a compressed vortex. *Phys. Fluids* **14**(7), 2543–2556 (2002)

- [4] Celik, I., Klein, M., Freitag, M., Janicka, J.: Assessment measures for URANS/DES/LES: an overview with applications. *J. Turb.* **7**(48), 1–27 (2006)
- [5] Celik, I., Yavuz, I., Smirnov, A.: Large eddy simulations of in-cylinder turbulence for internal combustion engines: a review. *Int. J. Engine Research* **2**(2), 119–148 (2001)
- [6] Celik, I.B., Cehreli, Z.N., Yavuz, I.: Index of resolution quality for large eddy simulations. *J. Fluids Eng.* **127**(5), 949–958 (2005)
- [7] Celik, I.B., Yavuz, I.: An assessment of turbulence scales relevant to internal combustion engines. *Internal Combustion Engine Division Spring Tech. Conf.* **28**(1), paper 97–ICE–5 (1997)
- [8] Cook, A.W., Cabot, W.H.: Hyperviscosity for shock-turbulence interactions. *J. Comput. Phys.* (2004)
- [9] Dugue, V., Gauchet, N., Veynante, D.: Applicability of large eddy simulation to the fluid mechanics in a real engine configuration by means of an industrial code. *SAE Paper (2006-01-1194)* (2006)
- [10] Eldredge, J.D., Bodony, D.J., Shoeybi, M.: Numerical investigation of the acoustic behavior of a multi-perforated liner. *aiaa paper 2007-3683*. In: 13th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference, Rome, 21-23 May 2007 (2007)
- [11] Fogleman, M., Lumley, J., Rempfer, D., Haworth, D.: Application of the proper orthogonal decomposition to datasets of internal combustion engine flows. *J. Turb.* **5**(023) (2004)
- [12] Forsythe, N., Müller, J.D.: Validation of a fluid-structure interaction model for a bileaflet mechanical heart valve. *Int. J. Comput. Fluid Dynamics* **22**(13), 541–553 (2008)
- [13] Fureby, C.: Towards the use of large eddy simulation in engineering. *Progress in Aerospace Sciences* **44**, 381–396 (2008)
- [14] Goryntsev, D., Klein, M., Sadiki, A., Janicka, J.: Large eddy simulation of fuel-air mixing in a direct injection SI engine. In: 5th Symp. on Turb. and Shear Flow Phenomena. Munich, Germany (2007)
- [15] Goryntsev, D., Sadiki, A., Klein, M., Janicka, J.: Large eddy simulation based analysis of the effects of cycle-to-cycle variations on air-fuel mixing in realistic DISI IC-engines. *Proc. Combust. Inst.* **32**, 2759–2766 (2009)
- [16] Gourdain, N., Gicquel, L., Montagnac, M., Vermorel, O., Gazaix, M., Staffelbach, G., García, M., Boussuge, J.F., Poinsot, T.: High performance parallel computing of flows in complex geometries - part 1: methods. *Comput. Science and Discovery* **015003**(2), 26pp (2009)
- [17] Gourdain, N., Gicquel, L., Montagnac, M., Vermorel, O., Gazaix, M., Staffelbach, G., García, M., Boussuge, J.F., Poinsot, T.: High performance parallel computing of flows in complex geometries - part 2: applications. *Comput. Science and Discovery* **015004**(2), 28pp (2009)
- [18] Hasse, C., Sohm, V., Durst, B.: Detached eddy simulation of cyclic large scale fluctuations in a simplified engine setup. *Int. J. Heat Fluid Flow* **30**, 32–43 (2009)

- [19] Hasse, C., Sohm, V., Durst, B.: Numerical investigation of cyclic variations in gasoline engines using a hybrid URANS/LES modeling approach. *Computers & Fluids* **39**(1), 25–48 (2010)
- [20] Haworth, D.: Large-eddy simulation of in-cylinder flows. *Oil & Gas Sci. Tech.* **54**(2), 175–185 (1999)
- [21] Heywood, J.B.: *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw and Hill Series in Mechanical Engineering. McGraw-Hill, New-York (1988)
- [22] Klein, M.: An attempt to assess the quality of large eddy simulations in the context of implicit filtering. *Flow, Turb. and Combustion* **75**(1-4), 131–147 (2005)
- [23] Klein, M., Meyers, J., Geurts, B.: Assessment of les quality measures using the error landscape approach. In: S. Netherlands (ed.) *Proc. of the Quality and Reliability in Large-Eddy Simulations*, vol. 12, pp. 131–142. Springer-Verlag Berlin (2008)
- [24] Lacour, C., Pera, C., Enaux, B., Vermorel, O., Angelberger, C., Poinso, T.: Exploring cyclic variability in a spark-ignition engine using experimental techniques, system simulation and large-eddy simulation. In: *Proc. of the 4th European Combustion Meeting*. Vienna, Austria (2009)
- [25] Lax, P.D., Wendroff, B.: Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy. *Commun. Pure Appl. Math.* **17**, 381–398 (1964)
- [26] Lumley, J.L.: *Stochastic Tools in Turbulence*. Academic Press New York (1970)
- [27] Maurel, S., Borée, J., Lumley, J.L.: Extended proper orthogonal decomposition: Application to jet/vortex interaction. *Flow, Turb. and Combustion* **67**, 125–136 (2001)
- [28] Mendez, S., Eldredge, J.: Acoustic modeling of perforated plates with bias flow for large-eddy simulations. *J. Comput. Phys.* **228**(13), 4757–4772 (2009)
- [29] Moin, P., Apte, S.V.: Large-eddy simulation of realistic gas turbine combustors. *Am. Inst. Aeronaut. Astronaut. J.* **44**(4), 698–708 (2006)
- [30] Moureau, V., Barton, I., Angelberger, C., Poinso, T.: Towards large eddy simulation in internal-combustion engines: simulation of a compressed tumble flow. *SAE Paper (2004-01-1995)* (2004)
- [31] Moureau, V., Lartigue, G., Sommerer, Y., Angelberger, C., Colin, O., Poinso, T.: Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.* **202**(2), 710–736 (2005)
- [32] Nicoud, F., Benoit, L., Sensiau, C.: Acoustic modes in combustors with complex impedances and multidimensional active flames. *AIAA Journal* **45**, 426–441 (2007)
- [33] Ozdor, N., Dulger, M., Sher, E.: Cyclic variability in spark ignition engines. A literature survey. *SAE Paper (950683)* (1994)
- [34] Patel, N., Menon, S.: Simulation of spray–turbulence–flame interactions in a lean direct injection combustor. *Combust. Flame* **153**(1-2), 228–257 (2008)

- [35] Poinso, T., Lele, S.: Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.* **101**(1), 104–129 (1992)
- [36] Poinso, T., Veynante, D.: *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition (2005)
- [37] Richard, S., Colin, O., Vermorel, O., Benkenida, A., Angelberger, C., Veynante, D.: Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. Combust. Inst.* **31**(3059-3066) (2007)
- [38] Rudy, D.H., Strikwerda, J.C.: A non-reflecting outflow boundary condition for subsonic Navier Stokes calculations. *J. Comput. Phys.* **36**, 55–70 (1980)
- [39] Schmitt, P., Poinso, T., Schuermans, B., Geigle, K.P.: Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner. *J. Fluid Mech.* **570**, 17–46 (2007)
- [40] Selle, L., Nicoud, F., Poinso, T.: The actual impedance of non-reflecting boundary conditions: implications for the computation of resonators. *AIAA Journal* **42**(5), 958–964 (2004)
- [41] Sirovich, L.: Turbulence and the dynamics of coherent structures. *Quart. Appl. Math.* **XLV**(3), 561–590 (1987)
- [42] Smagorinsky, J.: General circulation experiments with the primitive equations: 1. the basic experiment. *Mon. Weather Rev.* **91**, 99–164 (1963)
- [43] Thobois, L., Lauvergne, R., Poinso, T.: Using LES to investigate reacting flow physics in engine design process. *SAE Paper* (2007-01-0166) (2007)
- [44] Toledo, M.S., Penven, L.L., Buffat, M., Cadiou, A., Padilla, J.: Large eddy simulation of the generation and breakdown of a tumbling flow. *Int. J. Heat Fluid Flow* **28**, 113–126 (2007)
- [45] Tran, N., Ducruix, S., Schuller, T.: Analysis and control of combustion instabilities by adaptive reflection coefficients. In: *Proceedings of the 13th AIAA/CEAS Aeroacoustics Conference*, AIAA Paper, vol. 3716, pp. 21–23 (2007)
- [46] Vermorel, O., Richard, S., Colin, O., Angelberger, C., Benkenida, A., Veynante, D.: Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES. *Combust. Flame* **156**, 1525–1541 (2009)
- [47] Young, M.B.: Cyclic dispersion in the homogeneous charge spark-ignition engine. a literature survey. *SAE Paper* (810020) (1981)

Compléments au chapitre 8

Modélisation du croisement de soupape

Pendant le croisement, les soupapes d'admission et d'échappement sont ouvertes simultanément. Les ondes acoustiques dans les conduits communiquent et peuvent alors avoir des influences bénéfiques ou néfastes sur la vidange du cylindre. Ainsi deux configurations classiques sont rencontrées :

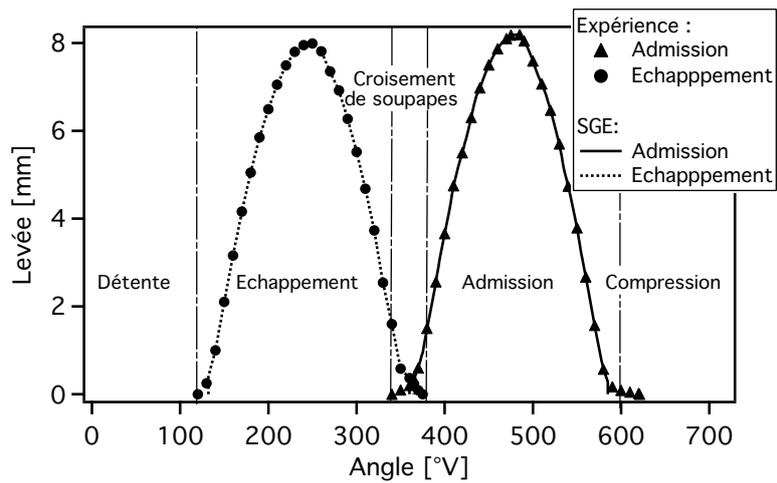
- la première constitue un état favorable où le conduit d'échappement est en dépression par rapport au conduit d'admission. Une vidange complète du volume mort est amorcée dans les lignes d'échappements. Cependant, une partie des gaz frais peut être transférée directement à l'échappement.
- Le conduit d'échappement est en surpression par rapport au conduit d'admission. Le balayage du cylindre se fait par un reflux des gaz brûlés du côté admission.

A un régime donné, le choix du croisement doit ainsi être optimisé. Pour le banc moteur F7P, les expérimentateurs ont cherché à supprimer ce croisement en vue d'une simplification pour la simulation. Cependant, pour garder un comportement réaliste de moteur à allumage commandé, le croisement a été minimisé à $20^\circ V$ comme le montre la Fig. 8.1. En SGE, ce croisement est modélisé par une ouverture fixe et simultanée des quatre soupapes à leurs levées résiduelles, levées minimums qui permettent une discrétisation de 8 points entre la tête et le siège de soupape sans pour autant obtenir un pas de temps trop limitant pour la simulation ($\Delta t < 10^{-8}$ s). Pour les soupapes d'échappement et d'admission, ces levées correspondent respectivement à 0.37 mm et 0.35 mm. Les soupapes étant à une ouverture plus grande que ce qu'elles voient pendant le croisement des essais, la durée de ce dernier a été réduite à $5^\circ V$.

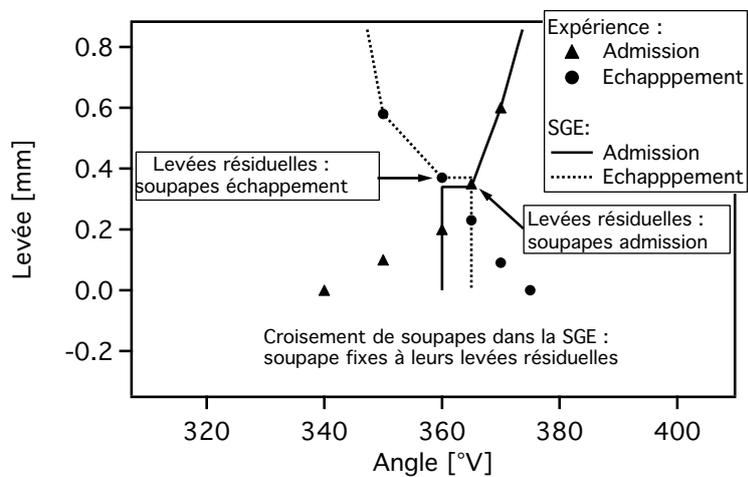
L'impact de cette modélisation est visible sur les sondes de pression des conduits d'admission. La figure 8.2 montre une comparaison entre une simulation sans croisement et une simulation en tenant compte. On s'aperçoit que le signal de pression pour les deux simulations voit après ouverture de l'admission (OA) une soudaine augmentation. Cependant, dans la simulation sans croisement cette augmentation accuse un retard par rapport aux mesures expérimentales en commençant à $-355^\circ V$. Même si ce retard n'affecte pas pour autant l'évolution du signal par la suite, il reste néanmoins important de capturer cette surpression à l'ouverture des soupapes puisqu'elle reflète le reflux des gaz du volume mort dans la ligne d'admission. Ce reflux est d'autant plus important pour un point avec combustion que la composition du reflux (gaz brûlés) diffère de celle de la ligne (gaz frais).

Comparaison avec une simulation sur maillage hexaédrique

Comme évoqué au chapitre 7, le maillage hexaédrique en configuration complexe de moteur à combustion interne est difficile à mettre en place. Ces difficultés sont illustrées sur la configuration F7P. Les maillages présentent une résolution du cylindre similaire (~ 0.8 mm) à celle observée en maillage tétraédrique. Excepté le type d'éléments, tous les autres paramètres restent identiques à la simulation présentée dans l'article (schéma numérique, modèle SGS, conditions aux limites). Les principales difficultés résident dans la résolution spatiale des sièges de soupapes à faibles levées comme le montre la Fig. 8.3(a). A $-335^\circ V$, en raison de la propagation du raffinement, il n'est pas aisé



(a)



(b)

FIG. 8.1 - (a) Levées des soupapes d'admission et d'échappement pour l'expérience et pour la SGE. (b) Vue rapprochée du croisement de soupapes.

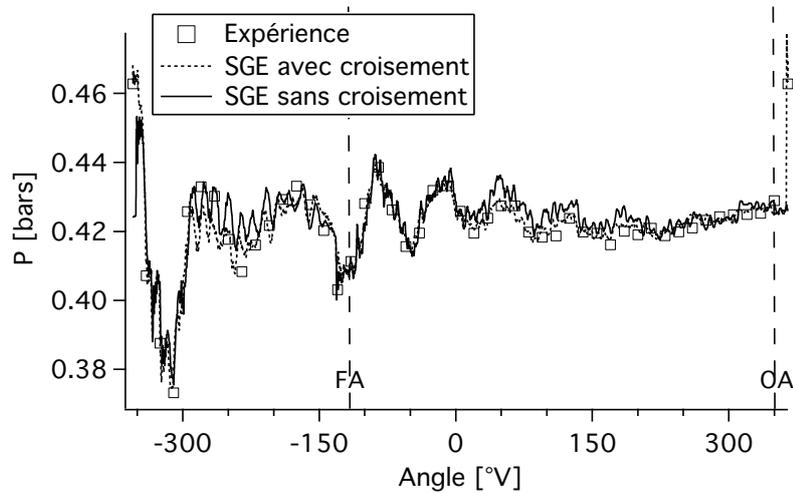


FIG. 8.2 - Comparaison d'une SGE avec modélisation du croisement de soupapes et d'une SGE sans modélisation sur la sonde de pression du conduit d'admission (sonde 3).

de discrétiser suffisamment cet endroit avec 7 points entre le siège et la tête de soupape pour le maillage hexaédrique contre 10 pour le maillage tétraédrique. Ainsi les forts gradients associés aux vitesses élevées induites à l'ouverture des soupapes d'admission sont moins bien résolus sur maillage hexaédrique menant à une activation importante de la viscosité turbulente ($\nu_t/\nu_{lam} \simeq 9$) (Fig. 8.3(b)). En comparaison, pour les tétraèdres, le rapport ν_t/ν_{lam} dans le siège de soupape n'excède pas une valeur de 0.5.

Le deuxième point est qu'AVBP nécessite l'utilisation de maillages avec des noeuds coïncidents. Ainsi le raffinement local se propage depuis la zone raffinée dans toutes les directions principales du maillage. En outre d'être coûteuses, ces propagations engendrent des sauts de volume dans le cylindre (Fig. 8.4(a)). La prédiction est alors fortement dégradée : l'écoulement suit les lignes de sauts de volume (Fig. 8.4(b)). La dynamique des jets de soupapes qui en résulte est totalement modifiée : la simulation sur maillage hexaédrique montre un jet enroulé autour de la tête de soupape alors que celle sur maillage tétraédrique présente à cet instant un jet décollé de la tête de soupape, plus cohérent avec le régime d'écoulement à la soupape décrit par Heywood [59] pour un rapport $L_S/D_S > 0.1$ (L_S correspond à la levée et D_S au diamètre de la tête de soupape).

Cette prédiction incorrecte des jets de soupape par le maillage hexaédrique entraîne une mauvaise prédiction de la dynamique du tumble. Celle-ci est illustrée sur la Fig. 8.5 où les champs moyens de chaque type de maillage sont confrontés aux champs expérimentaux PIV à $-240^\circ V$. Les champs moyens de la SGE sur éléments hexaédriques sont obtenus par une moyenne d'ensemble sur 25 cycles. On remarque sur la composante axiale (composante suivant X) de la vitesse moyenne que le tumble prédit par le maillage hexaédrique n'a pas encore impacté le piston contrairement à ce qui a été mesuré et ce qui est prédit par la SGE réalisée avec tétraèdres. Cet exercice montre une fois de plus l'importance du maillage dans ces simulations et confirme le potentiel des tétraèdres qui fournissent des discrétisations plus homogènes et isotropes que les hexaèdres.

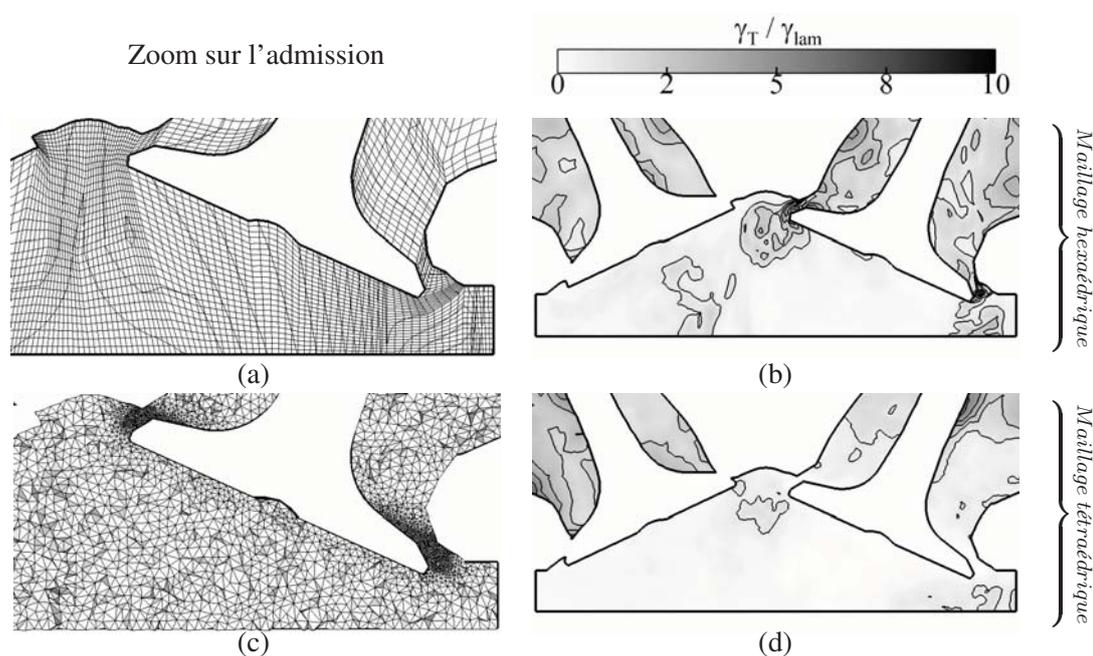


FIG. 8.3 - Comparaison de simulations sur maillage hexaédrique et tétraédrique à l'angle $-335^\circ V$. Champs instantanés de rapport ν_t/ν_{lam} entre la viscosité turbulente et la viscosité laminaire.

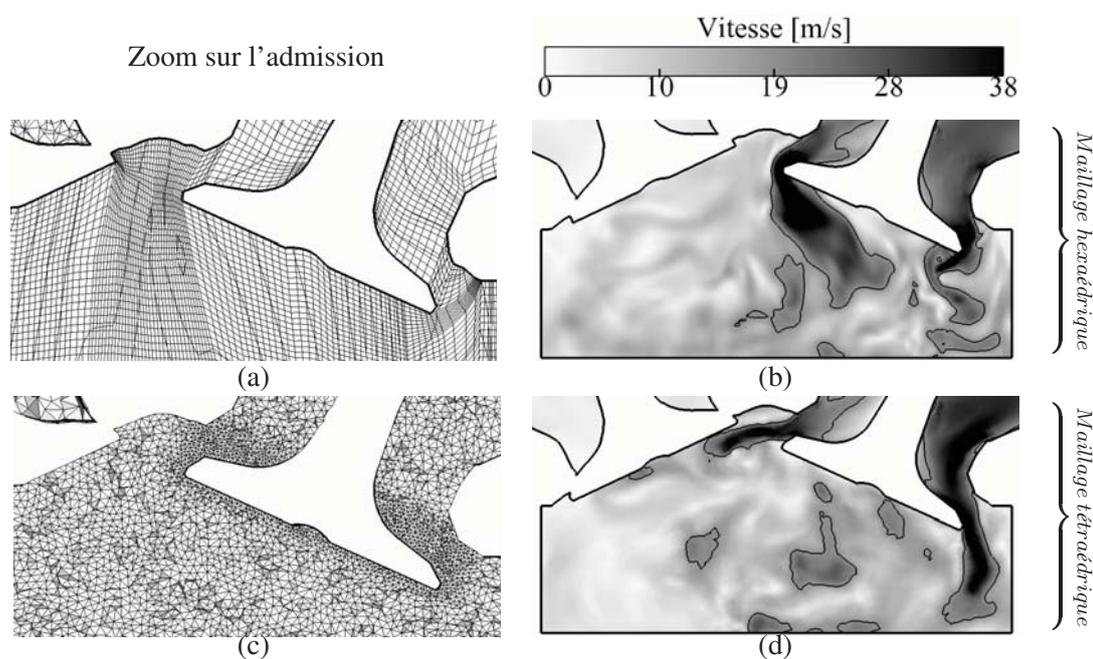


FIG. 8.4 - Orientation des jets de soupape à l'angle $-310^\circ V$ sur maillage hexaédrique et tétraédrique. Champs instantanés de magnitude de vitesse.

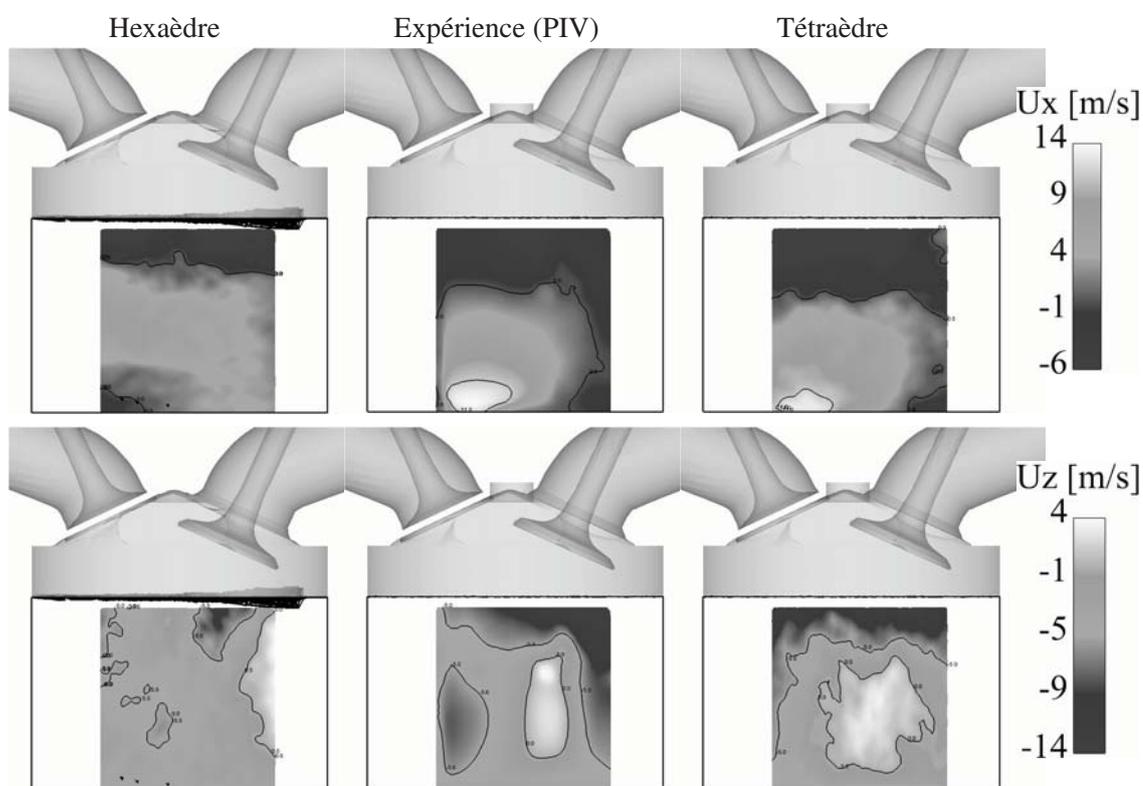


FIG. 8.5 - Comparaison des champs moyens de vitesses axiale (composante en X) et verticale (composante en Z) dans le plan de symétrie entre les soupapes (plan 5).

Intérêt du calcul massivement parallèle

Il y a tout juste 3 ans, le calcul d'un cycle du moteur à allumage commandé XU10, avec un maillage moins fin que celui utilisé pour le F7P, nécessitait 5 jours sur 32 processeurs d'un cluster Xeon Linux [155, 126]. Avec l'augmentation du nombre de processeurs par machine, le temps de retour d'un cycle moteur a été réduit à 18 h, avec une moyenne de 400 processeurs sur les phases de calcul du cycle moteur.

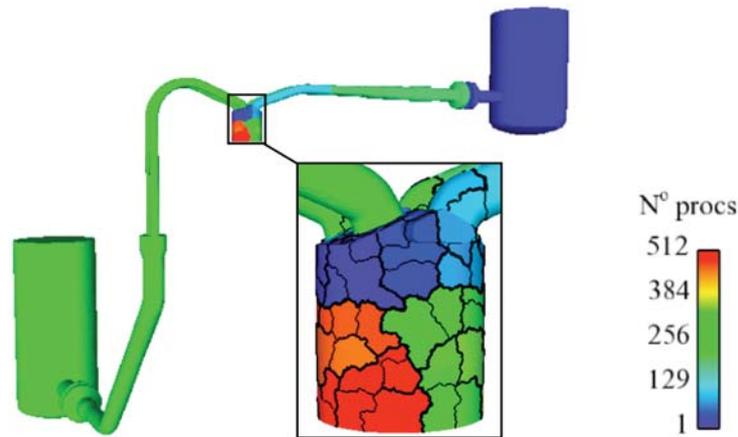


FIG. 8.6 - Exemple de partitionnement du domaine de calcul du banc moteur F7P avec l'algorithme *k*-way utilisé par METIS [72].

L'utilisation de ce grand nombre de processeurs dans AVBP est rendue possible par la décomposition du domaine de calcul en partitions (Fig. 8.6) et l'utilisation de la librairie MPI (pour *Message Passing Interface* en anglais) qui gère les communications entre ces partitions. Grâce à cette gestion du parallélisme, le code AVBP atteint d'excellentes performances sur différents calculateurs. Ces performances sont souvent évaluées par le speedup normalisé, rapport entre le temps de retour sur N processeurs et celui lié au nombre minimum de processeurs qui peuvent être utilisés sur l'application (le nombre minimum de processeur est lié à leur taille mémoire) [52]. Toutefois, pour garder un parallélisme efficace sous AVBP, une attention particulière doit être portée au ratio entre le nombre de cellules du maillage et le nombre de processeurs. En maillage tétraédrique, des tests réalisés pour un maillage de 3 million de cellules sur la SGI Altix ICE 8200 du CINES montrent que l'efficacité optimale est obtenue avec un ratio de 10 000 cellules par processeurs² (Fig. 8.7). Ce ratio est directement lié à la charge du processeur dédiée au calcul sur la charge liée aux communications. Au delà de cette valeur limite, le temps de restitution n'est plus linéaire et l'efficacité du code est dégradée. Cette valeur optimale a alors été recherchée pour chacune des 41 phases du calcul F7P.

Cette bonne scalabilité du code permet d'entrevoir des calculs sur des maillages où la résolution spatiale sera augmentée. Cet effet qui est recherché en calcul de chambre de combustion annulaire de turbine à gaz pour résoudre plus finement les flammes de chaque brûleur [149, 16] n'est pas le premier escompté

²Au delà de 300 processeurs, soit 10 000 cellules par processeurs, le speedup normalisé s'effondre.

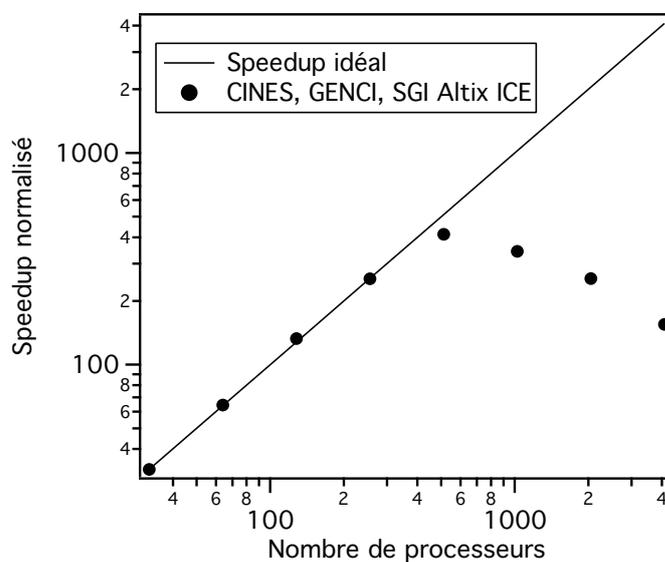


FIG. 8.7 - Speedup du code AVBP pour un maillage de 3M de cellules sur une SGI Altix ICE 8200.

en calcul de moteur à piston. En effet, une réduction de la taille des cellules suppose d'augmenter les phases de remaillage, soit d'augmenter le nombre d'interpolations globales. Le raffinement serait au final essentiellement utile pour la combustion qui ne représente que 4 phases sur 41 pour le calcul du point stable (cf. chapitre 9). Pour un calcul de moteur à piston, une machine possédant des processeurs rapides à un très grand nombre de processeurs semble donc aujourd'hui plus efficace. Par exemple, à nombre de processeurs égal, la simulation d'un cycle moteur F7P sur une SGI Altix ICE 8200 prend 6 fois moins de temps que sur une IBM BlueGene/L.

Troisième partie

Application de la méthodologie SGE en moteur avec combustion

Table des matières

9	Simulation d'un point stable du banc moteur F7P	175
9.1	Description du point de fonctionnement : le point <i>stab_ref</i>	175
9.2	Stratégie numérique	178
9.2.1	Maillage et domaine de calcul	178
9.2.2	Paramètres numériques	178
9.2.3	Condition initiale et conditions aux limites	179
9.3	Résultats et discussion	180
9.3.1	Comportement des lignes d'admission et d'échappement	181
9.3.2	Structure de l'écoulement interne avant combustion	182
9.3.3	Analyse de la combustion	183
9.3.4	Variations cycle à cycle de la combustion	194
9.4	Conclusion	202
10	Simulation d'un point instable du banc F7P	205
10.1	Description du point <i>instab_dil</i>	205
10.2	Modélisation par SGE	206
10.2.1	Mise en place du calcul	206
10.3	Résultats	210
10.3.1	Convergence de la SGE	210
10.3.2	Activité des lignes d'admission et d'échappement	210
10.3.3	Aérodynamique dans le cylindre	211
10.3.4	Analyse de la combustion	212
10.3.5	Indicateurs globaux de variations cycle à cycle	215
10.3.6	Sources des variations cycle à cycle	219
10.4	Conclusion	222
	Conclusion générale	227
	Bibliographie	229

Simulation d'un point stable du banc moteur F7P

L'étude présentée dans le chapitre 8 constitue une première étape dans la mise au point d'une méthodologie visant à prédire des VCC sur un banc moteur à allumage commandé. Cette configuration entraînée a permis de valider l'aérodynamique moyenne dans le cylindre ainsi que ses VCC. Il est alors intéressant dans un second temps d'évaluer le potentiel de la méthodologie proposée sur une application plus réaliste : le banc moteur avec combustion. La tâche du présent chapitre consiste à rajouter deux niveaux de couplage supplémentaires par la modélisation de l'allumage et de la combustion en faisant intervenir les modèles présentés en partie I (DTFLES, cinétique réduite et modèle de dépôt d'énergie). Ce chapitre présente une étude SGE de la combustion d'un point de fonctionnement stable du banc moteur F7P : le point *stab_ref*. Dans un premier temps, la géométrie et le point moteur sont décrits. Dans un second temps, les résultats sont présentés à travers plusieurs analyses, en s'intéressant tout d'abord à la topologie de la flamme et en soulignant les variations de la combustion. Enfin ces variations sont analysées pour essayer d'en expliquer le mécanisme.

9.1 Description du point de fonctionnement : le point *stab_ref*

Le point de fonctionnement *stab_ref* est le pendant avec combustion du point *moteur entraîné* simulé précédemment. La géométrie reste inchangée (Fig. 9.1(a)), les pressions des lignes sont très proches de celles rencontrées en *moteur entraîné* : la ligne d'échappement est à pression atmosphérique, et la ligne d'admission est alimentée par un mélange propane-air à une température de 300 K résultant en une pression de 0.44 bar.

Pour ce point de fonctionnement, le banc moteur opère en injection indirecte. Les débits d'air et de propane sont contrôlés par des cols soniques menant à des débits respectifs de 5.5 kg/h et 0.35 kg/h. L'injection de propane est réalisée dans la cuve de mélange par de multiples trous en fond de cuve favorisant le mélange du propane et de l'air. Par ce procédé, le mélange dans la cuve peut alors être considéré

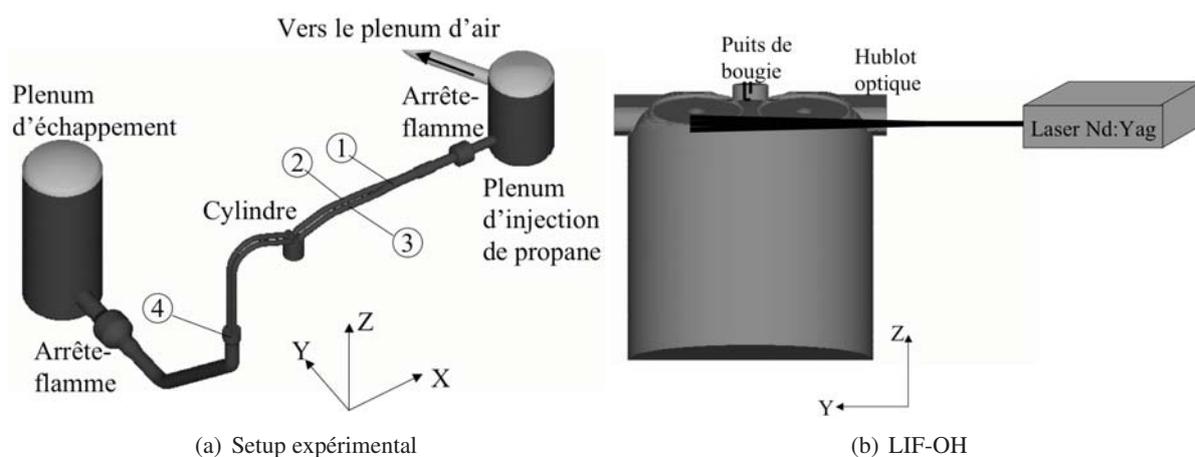


FIG. 9.1 - Schémas du dispositif expérimental. La sonde 1 est située au diffuseur d'admission et la sonde 4 au collecteur d'échappement.

comme parfaitement prémélangé et correspond à une richesse de 1. Les paramètres de la géométrie ainsi que les caractéristiques du moteur sont résumés en Tab. 9.1.

L'allumage de cette configuration est réalisé par une bougie montée dans un puits situé en position centrale du toit de culasse. Le diamètre du puits est de 12 mm et son volume est estimé à 0.65 cm^3 . La position de la bougie est assez haute (à hauteur du toit de culasse) pour éviter des réflexions lasers qui perturberaient les diagnostics optiques. L'écart vertical entre électrodes est d'environ 1.2 mm .

Le point *stab_ref* est considéré comme le point stable de référence de la base de données expérimentales puisque son avance à l'allumage (AVA), égale à $20^\circ V$, permet d'atteindre le meilleur compromis entre une PMI moyenne maximum (2.97 bars) et des fluctuations de PMI minimales avec une covariance de 1.12% (Fig. 9.2). Pour ce point moteur, 100 cycles consécutifs ont été acquis.

Plusieurs diagnostics ont été réalisés sur ce point moteur. Similairement à ce qui a été acquis sur le point *moteur entraîné*, des sondes de pression rapides (numérotées de 1 à 4 sur la Fig. 9.1(a)) ont permis de quantifier l'activité acoustique des tubulures, et l'évolution cycle à cycle de la pression chambre a été mesurée. L'acquisition a été effectuée tous les degrés vilebrequin ce qui correspond à une fréquence de 7200 Hz .

La PIV cylindre n'a pas été réalisée sur ce point de fonctionnement car il n'était pas possible de conserver la chemise en quartz avec les hautes températures de la combustion. L'activité de la chambre et en particulier la propagation de la flamme a été étudiée par les hublots situés de part et d'autre du toit de culasse dans un plan horizontal (X,Y) situé 8 mm en dessous du point d'allumage (voir Fig.9.1(b)). La structure de la flamme et sa localisation sont étudiées par fluorescence induite par plan laser (PLIF) du radical OH^* , dont l'émission est capturée par une caméra ICCD à travers le piston transparent via le miroir situé en dessous. Ces radicaux formés dans le front de flamme et présents dans les gaz brûlés sont de bons indicateurs de l'interface entre les gaz frais et les gaz brûlés pour une flamme de prémélange.

Paramètres moteurs :	Alésage	82 mm
	Course	83.5 mm
	Taux de compression	9.9
	Longueur de bielle	144 mm
Point de fonctionnement :	Régime moteur (Ω_{RPM})	1200 $tr.min^{-1}$
	AVA	20°V
	Ouverture admission (OA)	350°V
	Fermeture admission (FA)	-120°V
	Ouverture échappement (OE)	120°V
	Fermeture échappement (FA)	-350°V
	$P_{admission}$ moyenne	0.443 bar
	$P_{échappement}$ moyenne	1.025 bar
	Richesse	1
	Taux de GBR	9.6%
	PMI	2.97 bar
	COV_{PMI}	1.12%

TAB. 9.1 - Caractéristiques du moteur F7P et du point de fonctionnement stab_ref. Les degrés vilebrequin sont relatifs au PMH combustion (0°V).

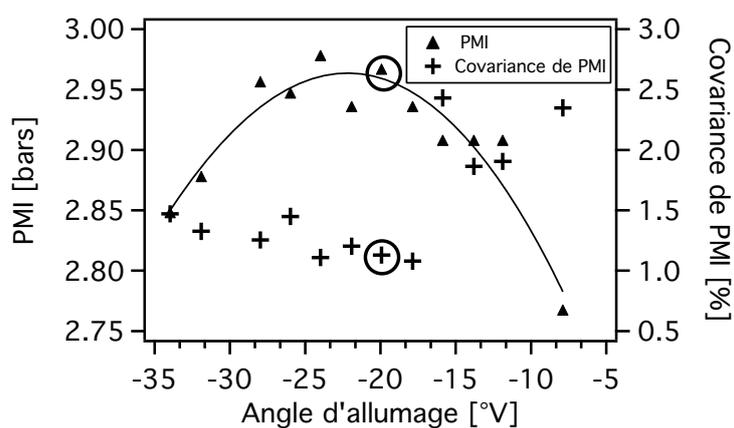


FIG. 9.2 - PMI moyenne et la covariance associée en fonction de l'avance à l'allumage pour le point de référence stable [83]. Résultats expérimentaux.

9.2 Stratégie numérique

9.2.1 Maillage et domaine de calcul

La méthodologie de maillage du point *moteur entraîné* a été reprise pour ce cas avec combustion. Un cycle moteur est toujours divisé en 41 phases de calculs correspondant à 41 maillages pour éviter des déformations trop importantes des éléments tétraédriques. La résolution spatiale durant tout le cycle est proche de $\Delta x = 0.8 \text{ mm}$ excepté pendant les phases de combustion (4 phases) où la résolution a été réduite à 0.65 mm sous le toit de culasse. Il est également important de noter que pendant la phase proche du PMH, qui s'étend de $-21^\circ V$ à $21^\circ V$, un raffinement du point d'allumage ($\Delta x = 0.2 \text{ mm}$) est nécessaire pour bien prendre en compte le développement du noyau de flamme dès les premiers instants (voir Fig. 9.3). En effet, les tests 1D de la section 6.4.2, ont montré qu'un minimum de 10 points est requis dans cette zone. Ce raffinement correspond à un rapport $\Delta x / \delta_L^{AVA} = 3$, où δ_L^{AVA} est l'épaisseur de flamme thermique pour les conditions thermodynamiques rencontrées à l'AVA. Le domaine de calcul reste identique à celui du point *moteur entraîné* en s'étendant du plénum où le propane est injecté jusqu'au plénum d'échappement (partie en gris foncé sur la Fig. 9.1(a)).

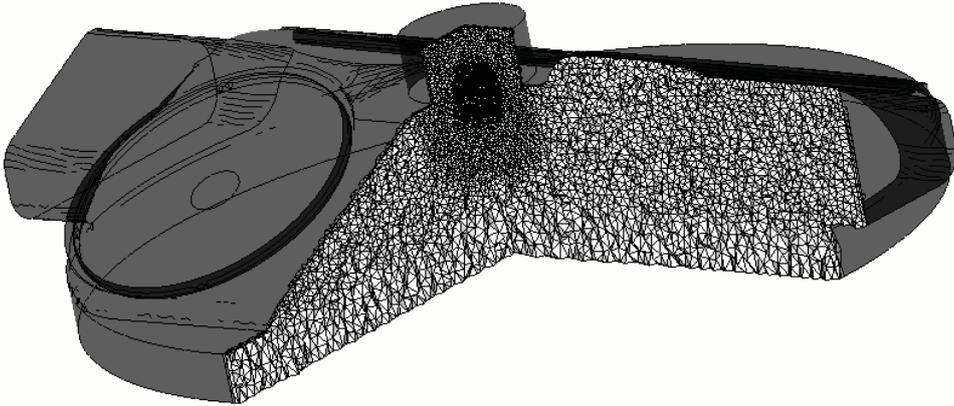


FIG. 9.3 - Maillage de la chambre de combustion pendant la phase de dépôt d'énergie avec un raffinement du point d'allumage.

9.2.2 Paramètres numériques

La simulation du point *stab_ref* est réalisée avec le schéma Lax-Wendroff [86]. Le modèle de sous-maille utilisé pour fermer l'équation de quantité de mouvement est le modèle de Smagorinsky standard [143] avec une constante $C_S = 0.18$. Pour l'allumage, en accord avec la section 6.1, seulement 10% de l'énergie de la bougie est déposée dans l'écoulement par le modèle de dépôt d'énergie, ce qui représente dans le cas présent 20 mJ . Afin

d'avoir un nombre de points suffisant dans le dépôt, le diamètre de la sphère de dépôt est pris égal à 2.5 mm , soit deux fois plus grand que l'écart entre électrodes. En ce qui concerne le temps de dépôt, aucune information a été relevée sur ce paramètre dans l'expérience. Il a alors été arbitrairement fixé à $100\mu\text{s}$.

Dès le dépôt d'énergie, le terme source chimique suit la loi d'Arrhénius basée sur le schéma cinétique à deux étapes et six espèces C3H8-BE2 proposé en section 5.2. La propagation de la flamme est assurée par le modèle de combustion turbulente DTFLES associé à la fonction d'efficacité développée par Colin (cf. section 3.3.2). Le nombre de points choisi pour résoudre le front de flamme est fixé à 4.

Les chocs aux ouvertures soupapes sont traités avec la méthode de Cook et Cabot [32] décrite à la section 4.6.

9.2.3 Condition initiale et conditions aux limites

Le calcul est initialisé avec un champ de vitesse et de pression issu du calcul *moteur entraîné* pris avant l'ouverture des soupapes d'admission. Pour les lignes d'admission et d'échappement, la température et la composition du mélange sont réinitialisées aux valeurs imposées en condition limite de leur plenum respectif (voir Tab. 9.2). La chambre de combustion est initialisée avec un mélange de gaz brûlés.

En entrée du plenum d'injection, une condition caractéristique sur la température, les fractions massiques des espèces et la pression est imposée. En sortie du plenum d'échappement, une condition caractéristique sur la pression est fixée. Pour chacune des cuves, les signaux de pression varient en temps et il sont imposés suivant la méthodologie appliquée dans la simulation du moteur à froid. Grâce au domaine de calcul très étendu, ces pressions varient peu. La figure 9.4 montre les pressions imposées dans le plenum d'entrée et de sortie.

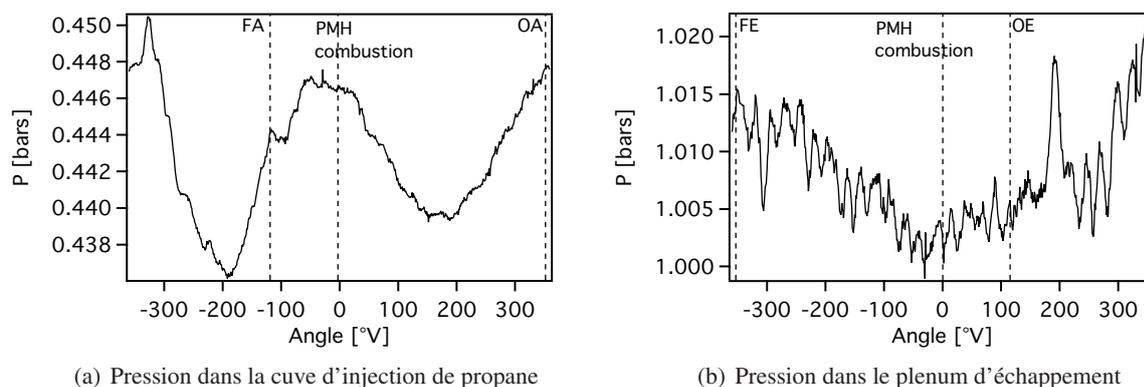


FIG. 9.4 - Pressions moyennes expérimentales dans les deux plenums (admission et échappement) à proximité du moteur

La température et les fractions massiques ont quant à elles des valeurs fixes. Dans ce calcul, l'injection de propane n'est pas modélisée. Le mélange propane-air est alors directement imposé en condition limite du plenum d'injection de propane, en supposant un mélange parfaitement prémélangé à la stoechiométrie.

Les murs sont traités grâce à des formulations de loi de paroi isotherme (vitesse + température, voir section 3.4). Toutes ces conditions limites sont résumées en Tab. 9.2.

Conditions limites	Description
Entrée du plenum d'admission (plenum d'injection de propane)	Entrée caractéristique : • $P_{\text{entrée}} = P(t)$ (Fig. 9.4(a)) , $T = 296 \text{ K}$
Gaz frais à $\Phi = 1$	• $Y_{\text{C}_3\text{H}_8} = 0.0602$, $Y_{\text{O}_2} = 0.2191$, $Y_{\text{N}_2} = 0.7207$ • $Y_{\text{CO}_2} = 0$, $Y_{\text{CO}} = 0$, $Y_{\text{H}_2\text{O}} = 0$
Sortie du plenum d'échappement	Sortie caractéristique : • $P_{\text{sortie}} = P(t)$ (Fig. 9.4(b))
Bloc moteur	Lois de paroi isothermes où les températures imposées sont issues d'une simulation 1D AMESim [90]) : $T_{\text{culasse}} = 438 \text{ K}$, $T_{\text{chemise}} = 430 \text{ K}$ et $T_{\text{piston}} = 435 \text{ K}$
Ligne d'admission	Loi de paroi isotherme : • Bloc moteur - Diffuseur : gradient de température linéaire • Diffuseur - Plenum de mélange : $T = 300 \text{ K}$
Ligne d'échappement	Loi de paroi isotherme : • Bloc moteur - Collecteur : gradient de température linéaire • Collecteur - Plenum d'échappement : $T = 300 \text{ K}$
Arrêtes-flamme	Parois couplées de type multi-perforation

TAB. 9.2 - Description des conditions limites du domaine de calcul.

9.3 Résultats et discussion

26 cycles¹ consécutifs ont été réalisés. La figure 9.5(a), décrivant l'évolution de la masse enfermée dans la chambre au cours des cycles, montre qu'un état quasi convergé est atteint dès le second cycle pour la masse enfermée. A partir de ce cycle, la masse enfermée se stabilise à une masse proche de la valeur expérimentale (181 mg), masse déterminée par une analyse de combustion 0D. La masse de gaz brûlés résiduels (GBR) dans le cylindre à la fin de l'échappement (Fig. 9.5(b)) montre le même comportement avec une masse stabilisée autour de 22.5 mg. Cette masse résiduelle correspond à un taux de GBR de 12.5% alors que celui donné par l'analyse de combustion de l'expérience est de 9.6%.

Ces résultats montrent que l'initialisation proposée en section 9.2.3 a permis d'atteindre un état rapidement convergé. Pour éviter une pollution des résultats présentés par la suite par la condition initiale,

¹Le temps de restitution d'un cycle SGE est de 32 h sur 400 processeurs d'un cluster SGI Altix ICE 8200.

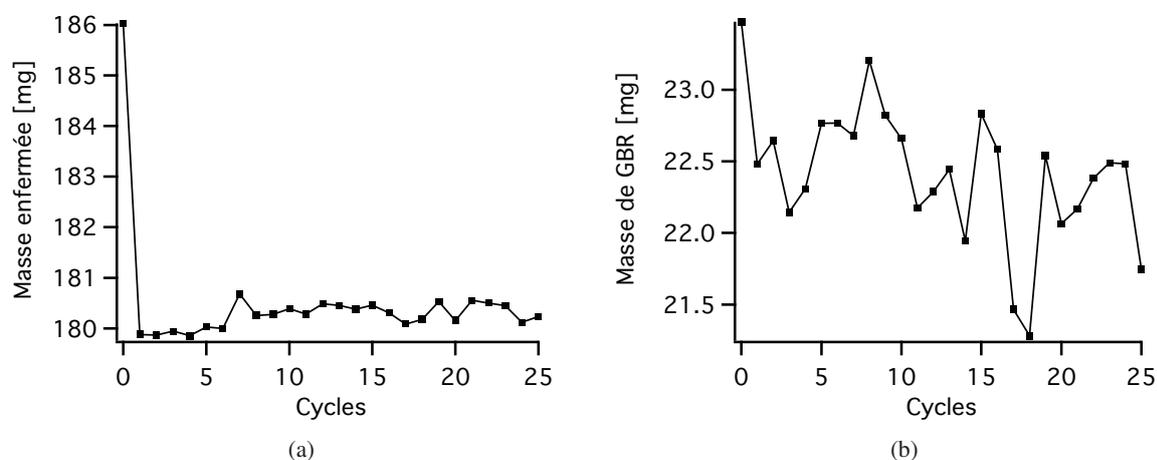


FIG. 9.5 - Composition du mélange enfermé dans le cylindre pendant les phases de compression, combustion et détente.

le premier cycle n'a pas été pris en compte. Ainsi seulement les 25 derniers cycles sont considérés et la notation cycle 1 correspondra par la suite au second cycle simulé.

9.3.1 Comportement des lignes d'admission et d'échappement

Le bon comportement acoustique mis en évidence sur le point de fonctionnement *moteur entraîné* est retrouvé sur ce point moteur. La comparaison des signaux de pressions moyennes SGE et expérimentale sur les sondes situées dans les lignes d'admission et d'échappement (sondes de 1 à 4 sur la Fig. 9.1(a)) montre que la SGE reproduit correctement l'acoustique de l'expérience pendant le cycle moteur (voir Fig. 9.6). Les évolutions de pression aux sondes 1, 2 et 3 confirment que l'acoustique qui assure le remplissage du cylindre à l'admission est similaire à l'expérience, avec un amortissement progressif des signaux pendant les phases de compression et d'échappement quand les soupapes d'admission sont fermées. On remarque cependant que la haute fréquence (430 Hz) observée en *moteur entraîné* est toujours présente, fréquence qui correspond au mode acoustique cinq-quart d'onde entre le bloc moteur et le plenum de propane. Cette fréquence n'est toujours pas observée expérimentalement. La présence de ce mode dans la SGE est probablement due à une impédance acoustique inappropriée en condition limite du plenum d'admission. Pour confirmer cette hypothèse, une solution à envisager serait de simuler également le plenum d'air, où la condition limite est acoustiquement bien définie puisque l'air est injecté par un col sonique.

La sonde 4 (Fig. 9.6(d)) située au collecteur d'échappement dénote un comportement semblable aux sondes de la ligne d'admission : l'amortissement ainsi que la phase de la pression sont correctement prédits par la SGE, cependant une haute fréquence vient se superposer au signal issu de la simulation. Si aucune explication n'a été trouvée sur l'amortissement de cette fréquence dans l'expérience et non dans la SGE, on peut cependant estimer que la présence de cette fréquence ne doit pas changer les conclusions

sur les variations cycle à cycle. En effet, cette fréquence est haute et joue peu sur le remplissage.

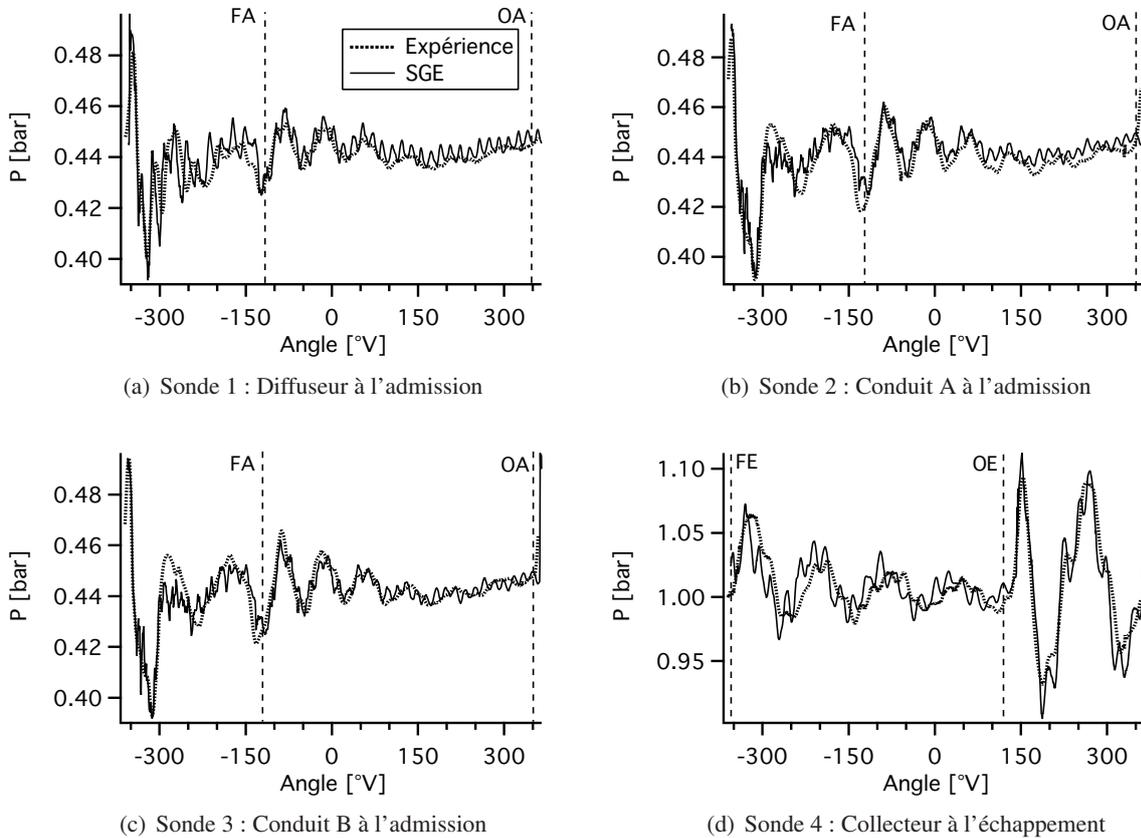


FIG. 9.6 - Pressions moyennes aux différentes sondes placées dans les lignes.

Pour étudier la dynamique moyenne dans les tubulures d'admission, la vitesse axiale moyenne SGE est comparée à l'expérience (Fig. 9.7) en un point situé sur l'axe de la tubulure au niveau de la sonde 3. Le comportement observé sur ce point moteur est très similaire à celui observé en *moteur entraîné*. Après ouverture des soupapes d'admission, un fort reflux est observé dans les tubulures pendant environ $25^\circ V$. Juste après, la vitesse négative indique que l'écoulement s'inverse avec un remplissage du cylindre jusqu'au point mort bas ($PMB = -180^\circ V$). Par la suite, la vitesse axiale moyenne dans les tubulures oscille autour de zéro et finit par s'amortir après la fermeture des soupapes.

9.3.2 Structure de l'écoulement interne avant combustion

La figure 9.8 présente la dynamique moyenne de l'écoulement pendant la phase d'admission (a et b) ainsi que pendant la phase de compression (c et d). Le moteur étant opaque pour les points de fonctionnement réactifs, aucune mesure PIV n'a été réalisée pour caractériser la dynamique dans le cylindre.

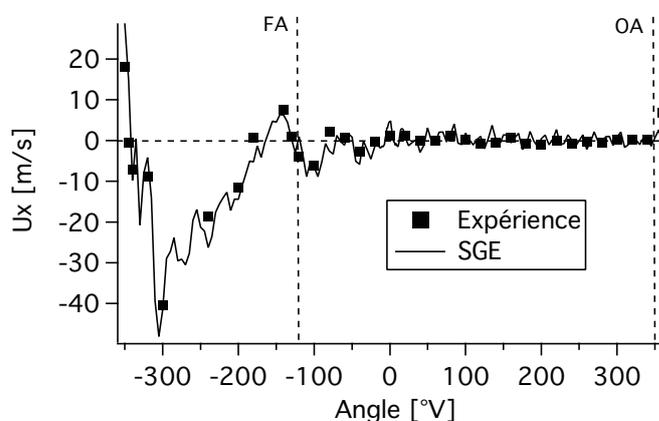


FIG. 9.7 - Vitesse axiale moyenne dans les tubulures d'admission à 260 mm de l'entrée de la chambre.

Par contre avant l'allumage, il est intéressant de comparer les champs de vitesse en combustion avec ceux calculés au chapitre 8. Les champs SGE de magnitude de vitesse moyenne, issus d'une moyenne de phase sur 25 cycles, sont donc comparés ici aux champs moyens issus de la simulation en moteur entraîné. On remarque que les champs moyens ont des topologies très similaires dans la forme du tumble. En fin de compression (Fig. 9.8(d)), la différence sur l'intensité du tumble s'accroît avec un mouvement fluide qui remonte plus haut sous la tête de culasse. Globalement, cette plus forte intensité est retrouvée à chaque instant du cycle et résulte en de plus grandes fluctuations de la dynamique de la chambre, sources potentielles de VCC. Ces vitesses plus élevées sont induites dès l'ouverture des soupapes d'admission où l'écart de pression entre la chambre et les tubulures ($\sim \Delta P = 0.6 \text{ bar}$) est plus important que celui rencontré en point *moteur entraîné* ($\sim \Delta P = 0.2 \text{ bar}$). Cette comparaison démontre l'importance des résiduels et de l'écoulement au début de l'admission sur les VCC. Bien que les conditions limites pendant l'admission soient les mêmes pour le cas *entraîné* et pour *stab_ref*, les conditions initiales au début de chaque admission dans le cas *stab_ref* mènent à des VCC plus importantes.

9.3.3 Analyse de la combustion

Grandeurs caractéristiques

Une manière d'évaluer le régime de combustion dans lequel ce point de fonctionnement se situe consiste à comparer les échelles et vitesses caractéristiques de la turbulence à celles des réactions chimiques. A cet effet, deux nombres adimensionnels sont classiquement utilisés :

- le nombre de Damköhler (Eq. 9.1) qui correspond au rapport du temps de retournement des plus grands tourbillons (l'échelle intégrale l_t) sur le temps chimique,
- et le nombre de Karlovitz (Eq. 9.2) qui correspond au rapport du temps chimique sur le temps de retournement des plus petits tourbillons (l'échelle de Kolmogorov η).

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c} = \frac{l_t/u'(l_t)}{\delta_L^0/S_L^0} \quad (9.1)$$

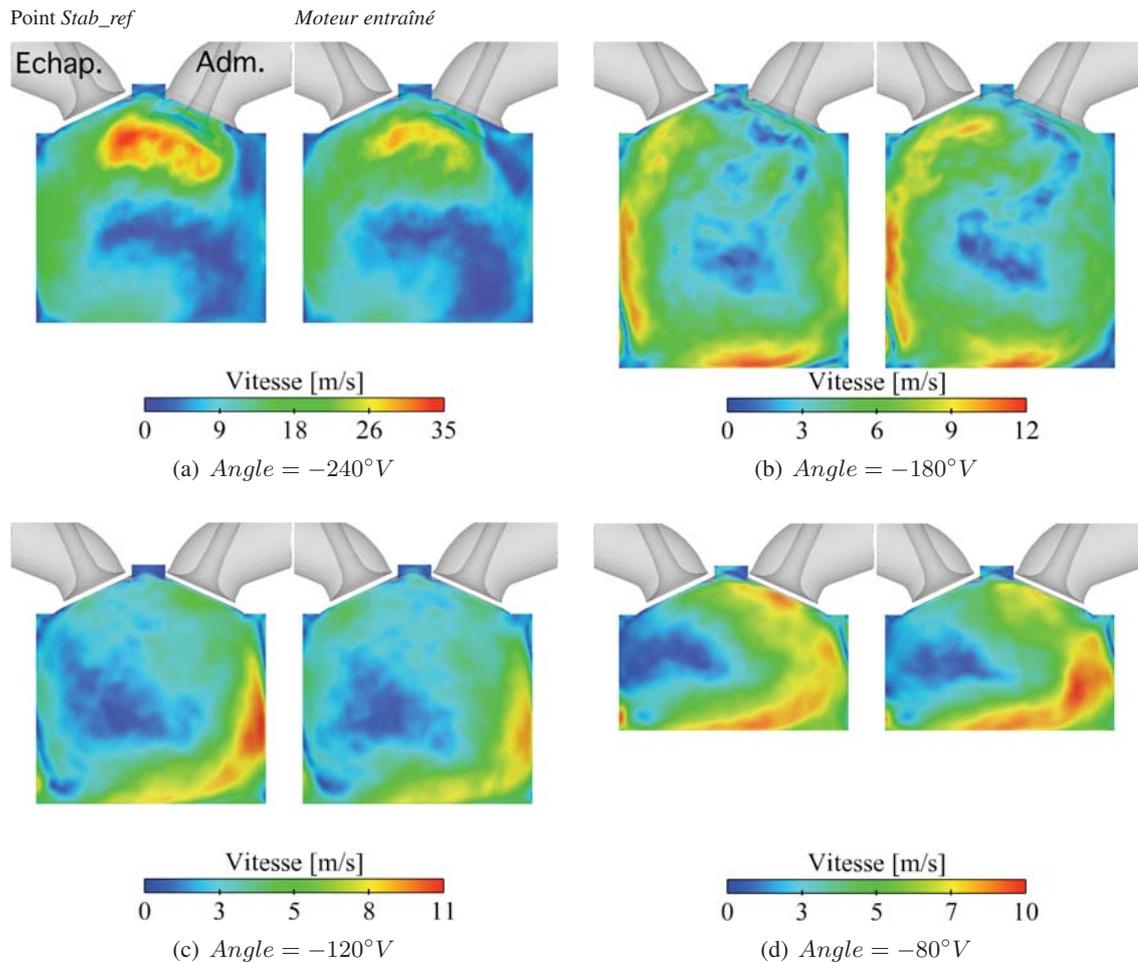


FIG. 9.8 - Magnitude de la vitesse moyenne dans le plan médian entre les soupapes. Comparaison entre le point *stab_ref* (combustion) et le point de fonctionnement en moteur entraîné (cf. chapitre 8).

$$Ka = \frac{\tau_c}{\tau_\eta} = \frac{\delta_L^0 / S_L^0}{\eta / u'(\eta)} \quad (9.2)$$

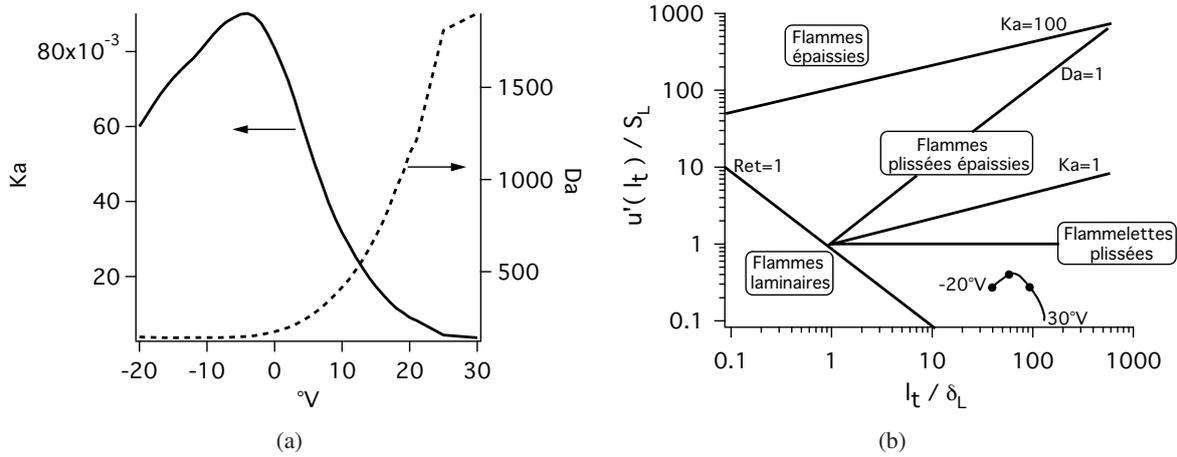


FIG. 9.9 - (a) Evolution du Damköhler et du Karlovitz pendant la phase de combustion. (b) Combustion du point stable sur le diagramme de Peters [116].

La vitesse de flamme laminaire S_L^0 est évaluée à partir de la simulation par la corrélation de Metghalchi et Keck [101] (cf. section 5.1). L'épaisseur de flamme laminaire δ_L^0 qui diminue avec l'élévation de pression et de température est estimée par la corrélation de Blint [15]. Pour déduire un temps de retour de grandes échelles, l'échelle intégrale l_t est considérée comme constante et approximée par la relation empirique proposée par Lumley [92] : $l_t = h_c/6$, où h_c est la distance entre le piston au PMH et le toit de culasse.

En supposant que la turbulence est homogène et isotrope, et en considérant une cascade de Kolmogorov, la vitesse de fluctuation de l'échelle intégrale peut être liée à la vitesse de fluctuation de sous-maille $u'(\Delta x)$ par la relation $u'(l_t) = u'(\Delta x) (l_t / \Delta x)^{1/3}$, où Δx est la taille du filtre. Pour cette relation $u'(\Delta x)$ est obtenue à partir des champs SGE par une méthode de similarité d'échelle identique à celle définie par Colin *et al.* [30]. Ainsi estimée, la Fig. 9.9(a) montre que le nombre de Damköhler observé pendant la combustion est de l'ordre de 120 entre l'AVA et le PMH puis augmente jusqu'à 1500 en fin de combustion. Les grands tourbillons doivent ainsi affecter la propagation de la flamme jusqu'au PMH. Le nombre de Karlovitz prend des valeurs bien inférieures à 1. Une autre façon de caractériser la combustion est de la représenter sur le diagramme de combustion de Peters [116] (Fig. 9.9(b)). Comme ce qui est classiquement observé pour un moteur à allumage commandé, elle se situe dans un régime de flammes minces plissées ce qui est cohérent avec le modèle de combustion DTFLES utilisé dans le calcul.

Comparaison de la SGE et de l'expérience

La propagation de la flamme et sa topologie ont été caractérisées expérimentalement par des LIF-OH dont le plan de mesure est montré sur la Fig. 9.10.

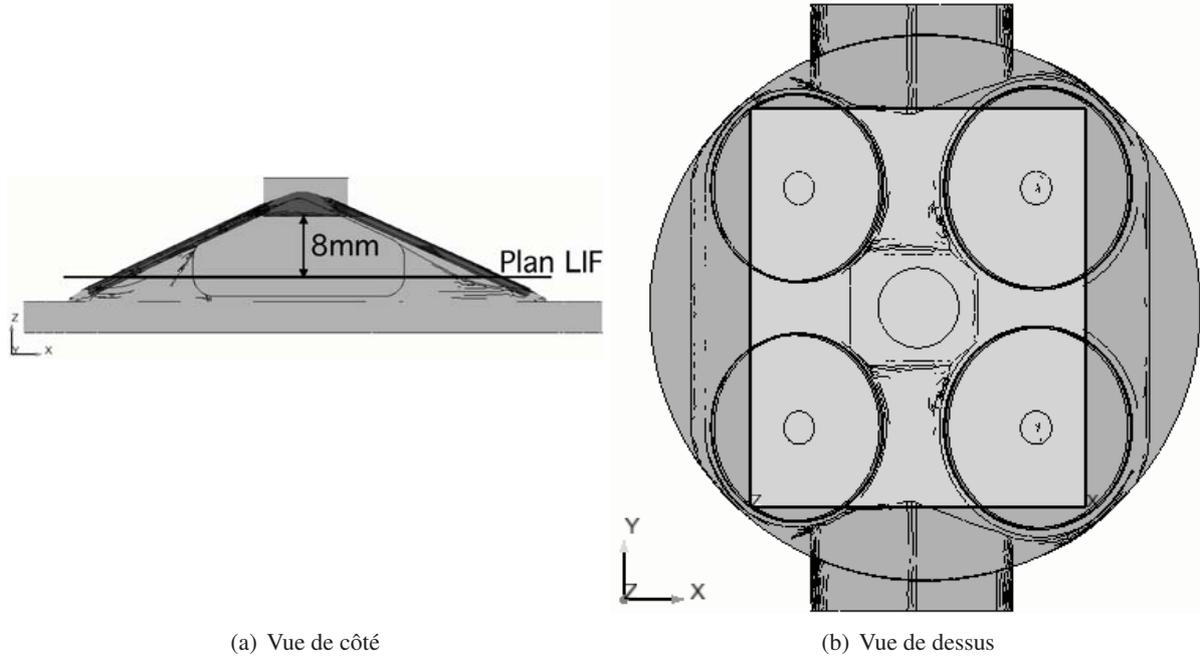


FIG. 9.10 - Plan de mesure LIF-OH. (a) La vue de côté indique que le plan de mesure se situe 8 mm sous le puits de bougie. (b) La vue de dessus montre, en gris clair, la fenêtre 2D du plan de mesure sur laquelle l'expérience et la SGE sont comparées (cf. Fig. 9.11).

Les LIF expérimentales ne sont pas directement comparables à la SGE puisque la chimie réduite utilisée pour le calcul ne présente pas le radical OH. Un traitement est alors appliqué à chaque LIF instantanée. Il consiste à détecter sur les champs de LIF-OH le front de flamme ainsi que les gaz brûlés. Tous les pixels du front de flamme et des gaz brûlés sont alors fixés à une valeur de 1 et les autres sont mis à 0. Une moyenne de tous ces champs traités fournit un champ moyen d'une quantité semblable à une variable d'avancement.

Dans la SGE, une variable d'avancement $\langle \Theta \rangle_n$ est définie par l'Eq. 9.3. Les champs moyens SGE et expérimentaux dénotent ainsi une présence de gaz brûlés : un pixel possédant une valeur de 1 indique que le front de flamme ou des gaz brûlés sont présents à cet endroit pour chacun des cycles instantanés, et inversement pour un pixel dont la valeur est nulle.

$$\langle \Theta \rangle_n = \frac{\langle Y_{C_3H_8}^{GF} \rangle_n - \langle Y_{C_3H_8} \rangle_n}{\langle Y_{C_3H_8}^{GF} \rangle_n - \langle Y_{C_3H_8}^{GB} \rangle_n}, \quad (9.3)$$

où $Y_{C_3H_8}^{GF}$ est la fraction massique de propane dans les gaz frais et $Y_{C_3H_8}^{GB}$ celle des gaz brûlés. $\langle \cdot \rangle_n$ corres-

pond à la moyenne de phase sur n cycles. Dans le cas présent $n = 25$.

La figure 9.11 compare à quatre angles successifs la variable d'avancement issue des champs moyens SGE à celle issue de l'expérience. La variable d'avancement moyenne expérimentale est calculée pour deux échantillons statistiques : le premier correspond à 100 cycles ce qui est le nombre total de cycles expérimentaux acquis, et le second est de 25 cycles pour évaluer la représentativité de l'échantillon statistique SGE.

La propagation de la flamme dans la SGE comme dans l'expérience est assez progressive avec une flamme qui s'étend principalement du côté de l'échappement ($X < 0$) jusqu'au PMH en raison du mouvement de tumble. Par rapport à la moyenne d'ensemble sur 100 cycles expérimentaux, la présence de flamme issue de la SGE est relativement similaire dans la forme avec toutefois un léger retard dans la propagation de la flamme pour tous les degrés présentés. Cet écart sur la présence de flamme peut provenir de l'échantillon statistique SGE considéré pour réaliser la moyenne d'ensemble (25 cycles) qui est relativement faible comparé à celui expérimental (100 cycles). La comparaison des moyennes d'ensemble expérimentales sur 100 cycles et 25 cycles montre qu'un échantillon statistique de 25 cycles introduit un biais pour chaque angle dans la présence de flamme. Cependant, il est relativement faible et la présence de flamme de 25 cycles expérimentaux est suffisante pour représenter la présence de flamme expérimentale. L'écart plus prononcé entre la SGE et la moyenne expérimentale sur 100 cycles n'est donc pas totalement lié au faible nombre de cycles simulés. Ces résultats indiquent alors que la flamme dans la SGE se propage dès l'initiation moins rapidement ($Angle = -10^\circ V$), et ce léger retard est conservé sur les trois angles vilebrequin qui suivent.

Mécanismes de propagation de la flamme

Pour déterminer plus en détail le mécanisme de propagation, le cycle 11 dont la pression cylindre est proche de la pression moyenne SGE est analysé. La figure 9.12, présentant des champs instantanés de température à différents instants du cycle, permet d'identifier quatre phases dans la combustion de ce point de fonctionnement :

1. **L'initiation** (de $-20^\circ V$ à $-11^\circ V$) : après le dépôt d'énergie un noyau sphérique est créé et convecté du côté échappement. Ce noyau possède initialement une forme sphérique et transitionne en fin de phase vers une flamme plissée.
2. **La propagation "libre"** (de $-11^\circ V$ à $-5^\circ V$) : ce noyau s'étend avec un front assez peu plissé et peu d'interaction avec les parois.
3. **La propagation "contrainte"** (de $-5^\circ V$ à $7^\circ V$) : l'interaction flamme/paroi devient de plus en plus forte en particulier au niveau du toit de culasse et du piston.
4. **L'extinction** (de $7^\circ V$ à $40^\circ V$) : la flamme, après avoir complètement brûlé les gaz frais du côté échappement, s'éteint aux parois de la chemise et se propage principalement du côté admission.

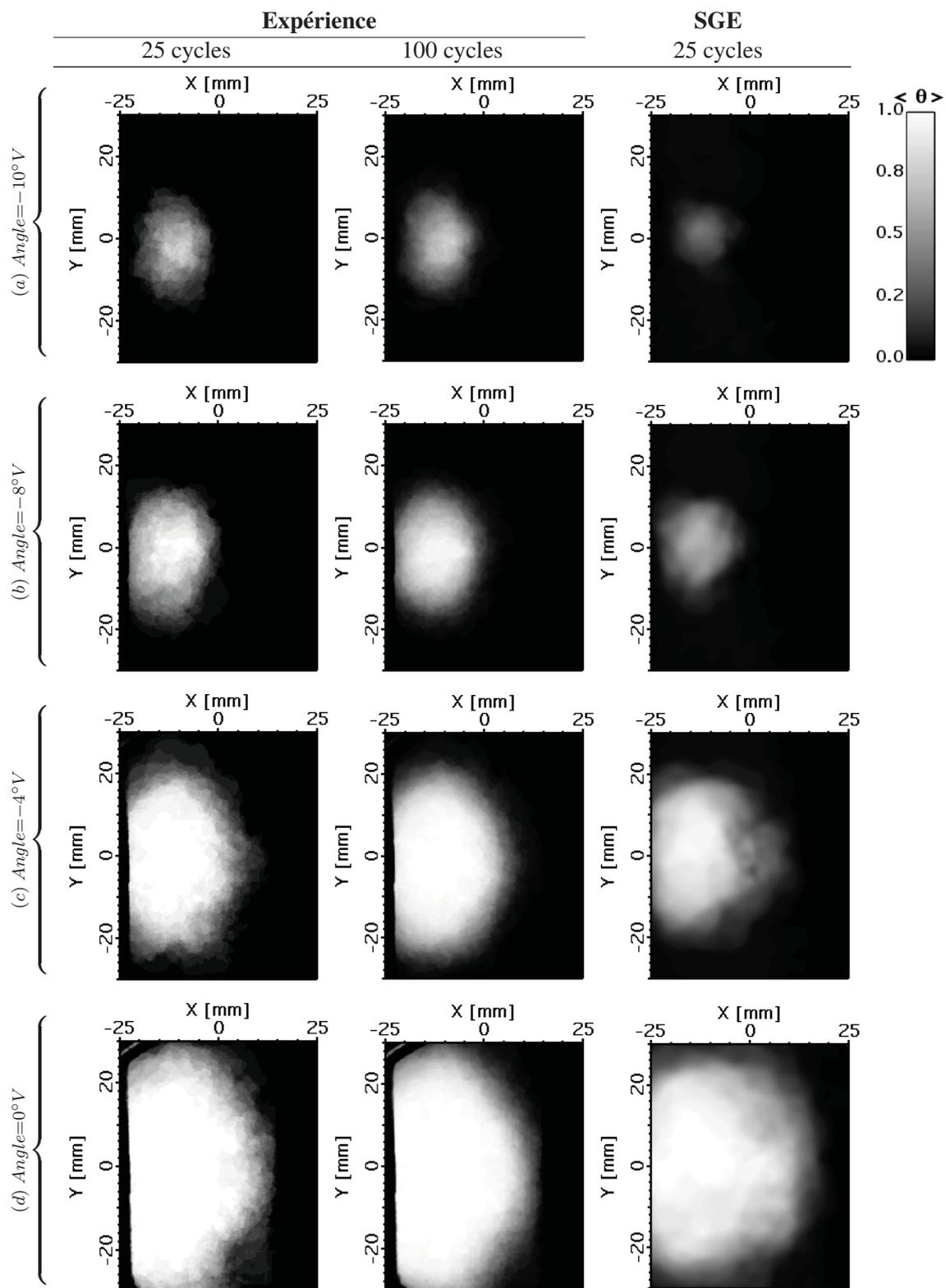


FIG. 9.11 - Comparaison des variables d'avancement moyennes entre la SGE et l'expérience dans un plan situé à 8 mm sous la bougie.

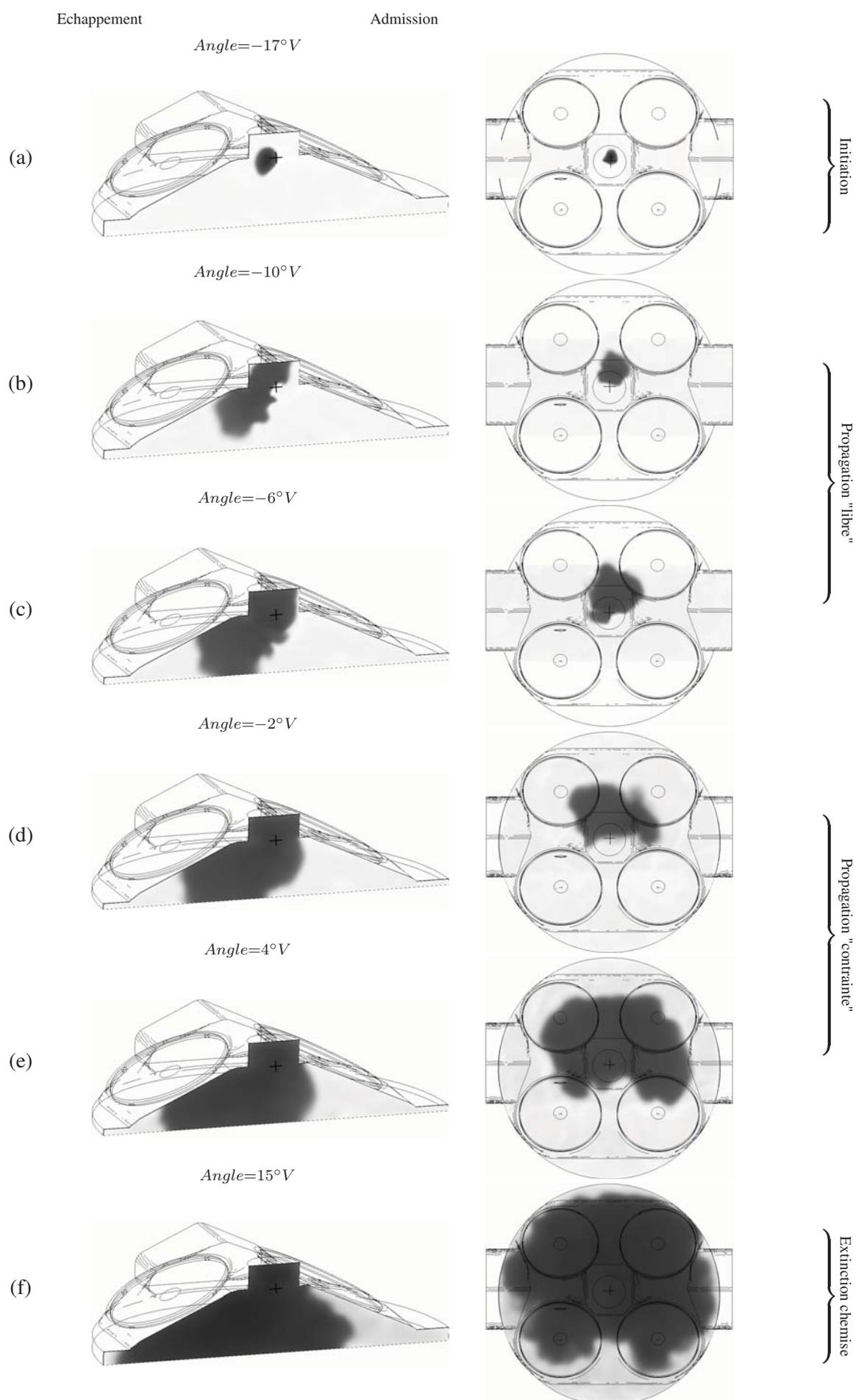


FIG. 9.12 - Coupes verticales (gauche) et horizontales (droite) colorées par la température instantanée du cycle 11 SGE (blanc : 700 → noir : 3000 K). Les degrés vilebrequin sont indiqués au dessus de chaque champ vertical. La position de la bougie est localisée par une croix.

Dans les premiers temps après le dépôt d'énergie (de $-19^\circ V$ à $-12^\circ V$), le noyau de flamme s'étend de manière quasi sphérique et est légèrement convecté vers l'échappement par le mouvement de tumble (Fig. 9.12(a)). Pour évaluer la manière dont la flamme se propage, deux vitesses sont utilisées :

- la vitesse de déplacement qui mesure la vitesse relative du front de flamme par rapport à l'écoulement. Cette vitesse est estimée par la relation suivante :

$$S_d = \frac{\rho^{GB}}{\rho^{GF}} \frac{dR}{dt}, \quad (9.4)$$

où ρ^{GB} et ρ^{GF} sont respectivement la masse volumique des gaz brûlés et des gaz frais. Le rayon peut se déduire du volume de gaz brûlés V^{GB} en considérant que la flamme est parfaitement sphérique soit $R = (3V^{GB}/4\pi)^{1/3}$.

- la vitesse de consommation qui caractérise la vitesse à laquelle les réactifs sont consommés. Elle peut s'exprimer grâce au taux de réaction et est définie par l'Eq. 9.5 :

$$S_c = \frac{1}{\rho^{GF} Y_{C_3H_8}^{GF} A_L} \int \dot{\omega}_{C_3H_8} dv, \quad (9.5)$$

où $\dot{\omega}_{C_3H_8}$ est le taux de réaction du propane, et $A_L = 4\pi R^2$ la surface de la sphère équivalente de rayon R au volume de gaz brûlés V^{GB} . Les réactifs étant parfaitement prémélangés, la vitesse de consommation doit être égale à la vitesse de déplacement tant que le noyau de gaz brûlés se propage de manière quasi-sphérique.

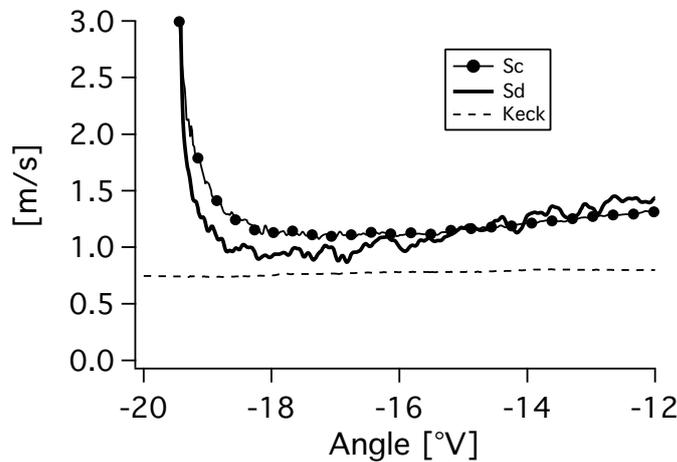


FIG. 9.13 - Evolution de la vitesse de consommation S_c et de la vitesse de déplacement S_d dans les premiers angles vilebrequin après allumage. La vitesse de flamme laminaire estimée par la corrélation de Keck est indiquée en référence.

La figure 9.13 compare ces deux vitesses et montre comme attendu que les vitesses de déplacement et de consommation ont des valeurs très proches. Dans les premiers instants après allumage (de $-19^\circ V$

à $-17^\circ V$), la comparaison à la corrélation de Keck indique que la croissance initiale de la flamme est proche d'une flamme laminaire. Par la suite, la flamme est convectée par le tumble en dehors du puits de bougie côté échappement et commence à interagir avec la turbulence de la chambre ce qui augmente sa vitesse de propagation.

Pour déterminer l'activité du modèle DTFLES pendant la propagation de la flamme, les valeurs moyennes de l'épaisseur F_f et de l'efficacité E_f vus par la flamme, définis par l'Eq. 9.6 sont tracées sur la Fig. 9.14 :

$$F_f = \frac{\int_V F \dot{Q} dv}{\int_V \dot{Q} dv} \quad \text{et} \quad E_f = \frac{\int_V E \dot{Q} dv}{\int_V \dot{Q} dv}, \quad (9.6)$$

où \dot{Q} est le dégagement de chaleur. Il est important de pondérer les moyennes par \dot{Q} pour ne prendre en compte que les zones de réaction.

On note que la formulation dynamique de l'épaisseur (cf. section 5.3) permet d'adapter le facteur d'épaisseur à l'épaisseur du front de flamme qui diminue avec l'augmentation de température des gaz frais pendant la compression. Pendant la phase d'initiation, le raffinement du maillage au point de dépôt induit de faibles valeurs de l'épaisseur (entre 1 et 5). L'épaisseur augmente progressivement pendant la phase de combustion pour atteindre une valeur de 70 à $20^\circ V$.

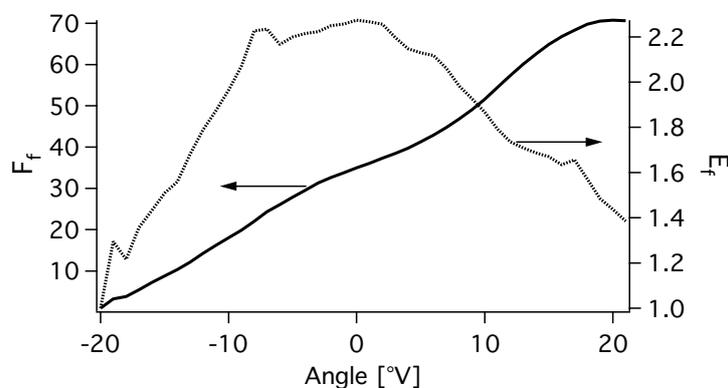
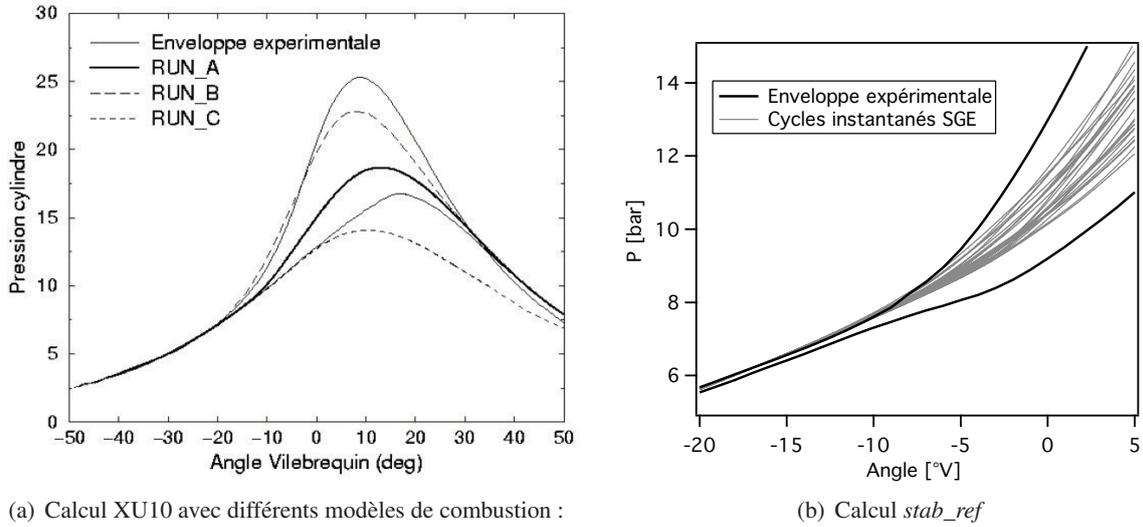


FIG. 9.14 - Evolution de l'épaisseur F_f (—) et de l'efficacité E_f (···) du modèle DTFLES vus par la flamme.

Le modèle de combustion utilisé dans cette étude (DTFLES) est un modèle à fermeture algébrique s'appuyant sur une hypothèse de plissement de sous-maille à l'équilibre. Il a été noté par S. Richard [125] que ce plissement n'atteint pas dès l'allumage une valeur d'équilibre. Dans leur simulation de moteur à allumage commandé, une durée d'environ $30^\circ V$ est nécessaire pour que l'hypothèse de plissement de sous-maille à l'équilibre soit vérifiée. Ils ont alors mis en évidence qu'un modèle algébrique construit avec cette hypothèse (le modèle de Boger) surestime après allumage la montée en pression en raison d'un plissement de sous-maille trop élevé (Fig. 9.15(a)). Ce constat est également vrai sur la simulation moteur menée par L. Thobois [155] utilisant le modèle DTFLES : une montée en pression trop rapide et



(a) Calcul XU10 avec différents modèles de combustion : CFM_LES (RUN_A et RUN_C) et modèle à fermeture algébrique de Boger (RUN_B). *Crédit S. Richard [125]*

(b) Calcul *stab_ref*

FIG. 9.15 - Evolutions de la pressions cylindre après allumage.

une augmentation soudaine après allumage de l'efficacité ($E = \Xi_{sgs}/\Xi_{res} \simeq 2.5$). Pour limiter cet effet du modèle de combustion, le raffinement de maillage en plus d'être nécessaire pour le dépôt d'énergie permet d'avoir dès l'activation de l'épaississement, des valeurs relativement faibles de l'efficacité, soit un plissement quasiment résolu sur le maillage pendant l'initiation de la combustion (Fig 9.14). L'efficacité moyenne croît progressivement de 1 à 2.2 en $10^\circ V$. Comme le montre la Fig. 9.15(b), l'évolution de pression qui en résulte est alors en très bon accord avec l'expérience puisque la montée en pression se place dans l'enveloppe expérimentale.

Afin de pouvoir délimiter sur chacun des cycles SGE les phases précédemment identifiées sur la Fig. 9.12, la fraction de masse brûlée (FMB) est prise comme repère. La phase d'initiation est ainsi délimitée entre l'AVA et le CA_2 , degré auquel 2% de la masse a été consommée. La phase de propagation "libre" est comprise entre le CA_2 et le CA_{10} , alors que la phase de propagation "turbulente" est caractérisée par une plage qui s'étend du CA_{10} au CA_{50} . Le CA_{50} détermine l'instant où la phase d'extinction de flamme à la chemise commence.

Pour la SGE, la FMB est estimée par une moyenne volumique de la consommation de propane donnée par l'Eq. 9.7.

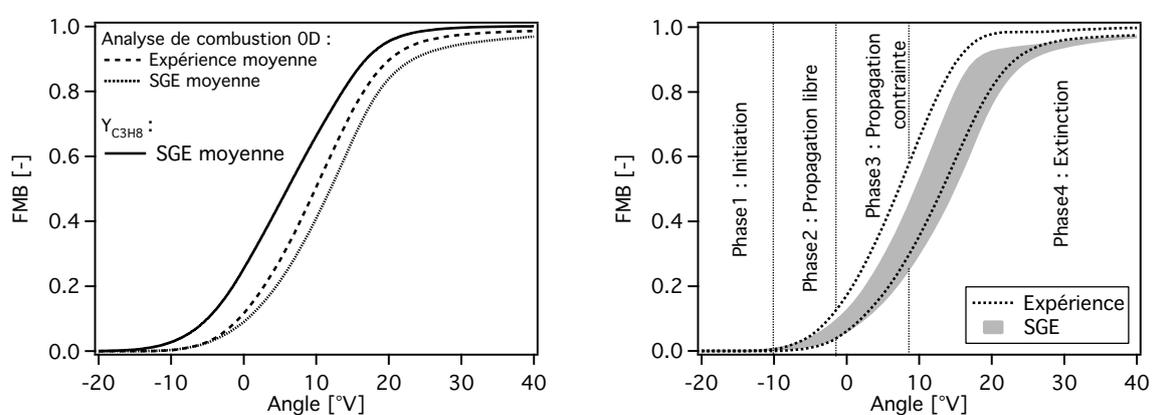
$$FMB = \frac{\int_V (Y_{C_3H_8}^{GF} - Y_{C_3H_8}) dv}{\int_V (Y_{C_3H_8}^{GF} - Y_{C_3H_8}^{GB}) dv} \quad (9.7)$$

Pour l'expérience, la FMB est issue d'une analyse de combustion. Dans cet outil 0D, les pertes de chaleur aux parois, $dq_{Woschni}/dt = A h_{Woschni}(T - T_{paroi})$, sont modélisées par la corrélation de Woschni [59], où A est la surface d'échange, T_{paroi} sont les températures de paroi fixées à une valeur constante et $h_{Woschni}$ le coefficient d'échange convectif. Ainsi le taux de dégagement de chaleur net Q_{hr}

est évalué à partir de la pression cylindre par l'Eq. 9.8 [59] ce qui permet d'en déduire la consommation des espèces et la FMB.

$$\frac{dQ_{hr}}{dt} = \frac{C_v}{\mathcal{R}} V \frac{dP}{dt} + \frac{C_v + \mathcal{R}}{\mathcal{R}} P \frac{dV}{dt} + (h - u + C_v T) \frac{dm_{cr}}{dt} + \frac{dq_{Woschni}}{dt}, \quad (9.8)$$

où $(h - u + C_v T) \frac{dm_{cr}}{dt}$ représente les fuites d'enthalpies liées aux fuites dans la segmentation ou *blowby*.



(a) FMB du cycle moyen SGE obtenue par l'Eq. 9.7 (—); FMB du cycle moyen expérimental obtenue par analyse de combustion (- - -); FMB du cycle moyen SGE obtenue par analyse de combustion (· · ·)

(b) Enveloppes de confiance à 95%

FIG. 9.16 - Fraction massique de carburant brûlé en fonction de l'angle vilebrequin relatif au PMH.

Sur la figure 9.16(a), la FMB du cycle moyen SGE est en avance par rapport à celle donnée par l'analyse de combustion du cycle moyen expérimental. Ce déphasage n'est pas cohérent avec le retard de propagation de la SGE observé sur les champs de variables d'avancement (Fig. 9.11). En effet, le biais est introduit par les hypothèses de l'analyse de combustion puisque les FMB issues des analyses de combustion des pressions moyennes SGE et expérimentale se superposent.

Les 25 cycles SGE ont alors été traités par l'outil d'analyse de combustion, et les variations de FMB sont ainsi comparées à celles de l'expérience. La figure 9.16(b) présente l'évolution temporelle des enveloppes de confiance. L'enveloppe de confiance détermine la zone où 95% des cycles sont présents et est définie par $FMB_{env}(t) = FMB_{moy}(t) \pm 2\sigma_{FMB}$, avec FMB_{moy} la FMB moyenne et σ_{FMB} l'écart type de FMB. Hormis un très léger retard ($\sim 1^\circ V$) de la SGE cohérent avec celui observé sur les présences de flamme, les variations issues du calcul sont en bon accord avec celles des essais.

9.3.4 Variations cycle à cycle de la combustion

Analyse globale

La pression cylindre est un indicateur classique de VCC [167, 59, 113]. La figure 9.17 présente son évolution temporelle en terme de pression moyenne et d'enveloppe de confiance à 95%. L'accord entre les pressions cylindre issues de la SGE et de l'expérience est très bon. Bien que le nombre de cycles simulés soit assez bas en comparaison à l'expérience et ne peut être considéré comme complètement représentatif, on s'aperçoit que les enveloppes de confiance sont très similaires. La faible variabilité du pic de pression capturée par la SGE (4.6%) est tout à fait réaliste comparée à l'expérience (4.7%). On peut noter toutefois un léger déphasage temporel entre les deux enveloppes pendant la phase de détente qui provient sûrement de la propagation de flamme légèrement trop lente identifiée sur les présences de flamme (Fig. 9.11). Une mauvaise prédiction des flux thermiques aux parois dans la SGE est également une cause probable de différence avec l'expérience.

Ce déphasage des enveloppes de pression ne rend ainsi pas possible la comparaison des plages de PMI rencontrées dans la SGE et dans les essais puisque la surévaluation de la pression dans la détente ($\sim 0.5 \text{ bar}$) augmente considérablement la PMI moyenne SGE. Le niveau de PMI moyenne dans la SGE est de 3.93 bar alors que celui des essais est 2.97 bar . Cependant, en terme de fluctuation de la PMI, les écarts types rencontrés dans la SGE et l'expérience sont relativement proches avec des valeurs respectives de 0.025 bar et 0.033 bar .

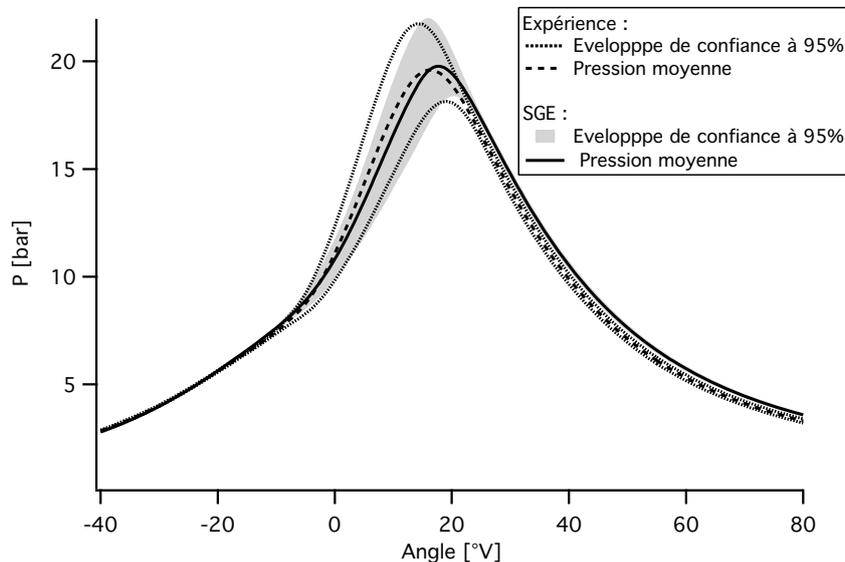


FIG. 9.17 - Evolutions des pressions cylindre expérimental et SGE.

Les VCC de la combustion peuvent également être étudiées en représentant le maximum de pression du cycle $n + 1$ en fonction du maximum de pression du cycle précédent n . La figure 9.18 confirme que le taux de variation assez bas pour ce point de fonctionnement est très similaire entre l'expérience et la

SGE. Les pressions moyennes et leur écart type sont très proches : 19.73 *bar* et 0.97 *bar* pour la SGE contre 19.73 *bar* et 0.93 *bar* pour l'expérience. On remarque également qu'il n'y a pas de corrélation apparente entre un cycle et son précédent avec une distribution complètement aléatoire de P_{\max}^{n+1} vs P_{\max}^n qui ne converge pas vers un cycle moteur unique.

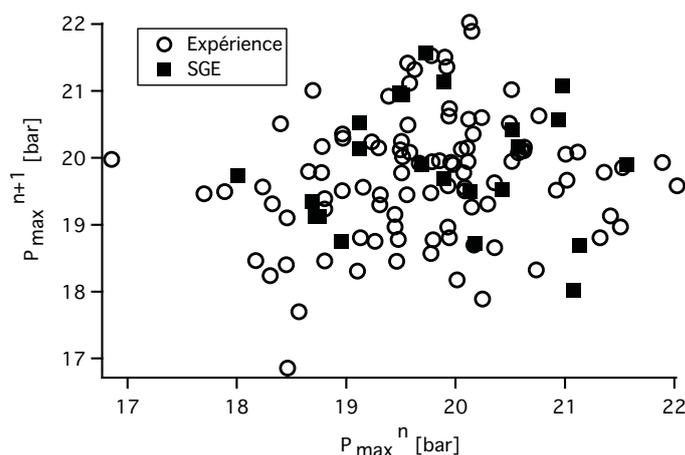


FIG. 9.18 - Maximum de pression cylindre du cycle $n + 1$ en fonction du maximum de pression cylindre du cycle n .

Les variations de pression observées sont une conséquence directe des variations de la combustion. Celles-ci peuvent être caractérisées par les évolutions des surfaces de flamme résolues (identifiées par l'iso-surface de variable d'avancement $\Theta = 0.5$) des 25 cycles SGE présentées en Fig 9.19. L'enveloppe contenant 95 % des cycles SGE est représentée en gris, 3 cycles typiques sont également présentés. Ces cycles bien qu'étant consécutifs (cycles 14, 15, 16) sont caractéristiques des combustions que l'on peut rencontrer dans la simulation de ce point moteur, avec des pressions cylindre maximum respectives de 20.98 *bar*, 21.08 *bar* et 18.01 *bar*.

L'évolution spatiale des surfaces de flamme de ces trois cycles est représentée à quatre instants différents, instants médians des phases décrites en section 9.3.3 (Fig. 9.20). Les surfaces de flamme montrent que le cycle 15 possède l'expansion de flamme la plus rapide ce qui est cohérent avec le fait que le pic de pression de ce cycle soit le plus élevé des trois. On remarque également que les géométries de flamme de chacun des cycles diffèrent dès leur phase d'initiation. Cette phase est connue pour être l'étape la plus cruciale dans la génération de VCC [168, 113, 68]. Ceci est en partie confirmée par la Fig. 9.3.4 qui présente une assez bonne corrélation entre le CA_2 et le CA_{90} (considérant une régression linéaire, le coefficient de Pearson est $R_{\text{Pearson}} = 0.75$) : un cycle qui brûle rapidement dès l'initiation de flamme mène généralement à une combustion rapide pendant toute la phase de combustion, soit à une pression cylindre située dans la partie haute de l'enveloppe. Cependant cette conclusion n'est pas aussi simple et des événements particuliers (principalement l'extinction de flamme aux parois) peuvent inverser la tendance initiale. Cette éventualité est illustrée par les surfaces de flamme du cycle 14 et 15 en Fig. 9.19. Ces deux cycles montrent des propagations similaires dans la phase d'initiation et de propagation "libre", et ils se différencient au début de la phase de propagation "contrainte" où le cycle 14 voit son taux de croissance de surface de flamme augmenter moins rapidement que celui du cycle 15. Sur l'ensemble des

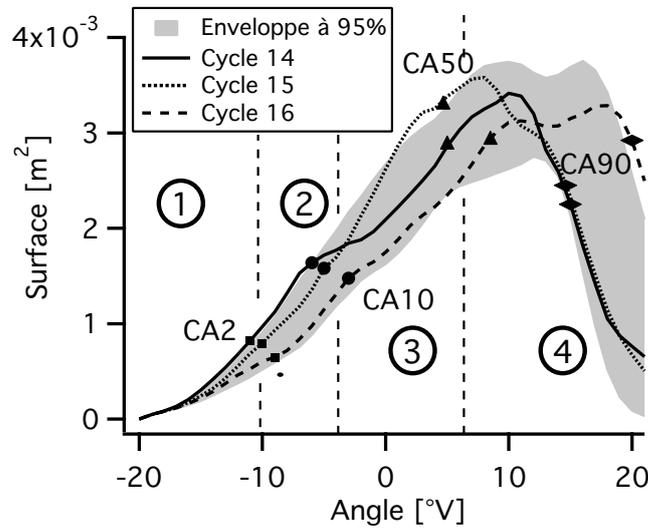


FIG. 9.19 - Evolution des surfaces de flamme résolues (les symboles représentent les CA_x).

cycles simulés, le passage d'une très bonne corrélation entre le CA_2 et le CA_{10} ($R_{\text{Pearson}} = 0.92$) à une corrélation modérée entre le CA_{10} et le CA_{50} ($R_{\text{Pearson}} = 0.76$) confirme que ces événements sont principalement situés dans la phase de propagation "contrainte". En ce qui concerne la phase d'extinction, elle ne semble pas intervenir dans les variations cycliques en introduisant un facteur supplémentaire de variations puisque la corrélation entre le CA_{50} et le CA_{90} est forte ($R_{\text{Pearson}} = 0.94$).

Sources des variations cycle à cycle de la combustion

Pour ce point de fonctionnement, la section précédente indique qu'un cycle lent se différencie généralement d'un cycle rapide dès la phase d'initiation durant laquelle la flamme passe d'un état de flamme sphérique laminaire vers un état turbulent où elle se plisse. Plusieurs facteurs peuvent influencer la durée de cette phase (cf. Tab. 1.2) :

- le système d'allumage : les pertes thermiques aux électrodes et des variations du claquage de la bougie,
- les conditions thermodynamiques (inhomogénéités de la température),
- le mélange à l'allumage : la richesse locale et le taux de dilution,
- la dynamique de l'écoulement dans le voisinage de la bougie (écoulement moyen et turbulence).

Pour cette simulation, le système d'allumage ne peut pas être une cause de variations puisque les électrodes ne sont pas maillées et la modélisation du claquage se fait par un dépôt d'énergie dont les paramètres (temps, taille et énergie déposée) restent identiques d'un cycle sur l'autre.

En terme de mélange, la richesse locale n'est également pas un paramètre significatif pour ce point moteur puisque l'air et le propane sont parfaitement prémélangés. De plus, comme le mélange est à la stoechiométrie, aucun réactif n'est présent à la fin d'un cycle pour légèrement modifier la richesse du

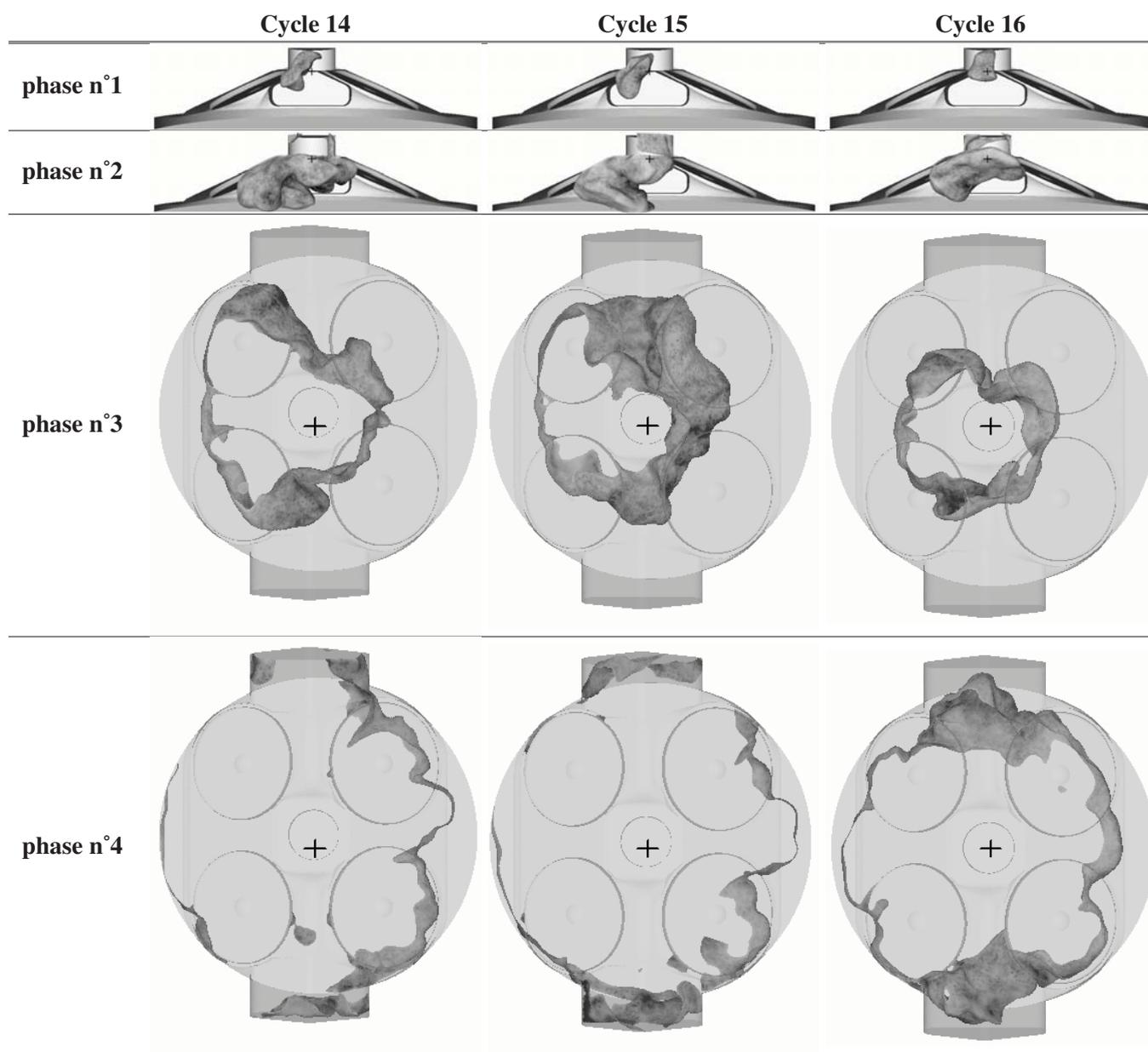


FIG. 9.20 - Iso-surface de variable d'avancement $\Theta = 0.5$ pour les cycles 14, 15 et 16 à 4 instants successifs (Angle = $-15, -7, 2$ et $16^\circ V$).

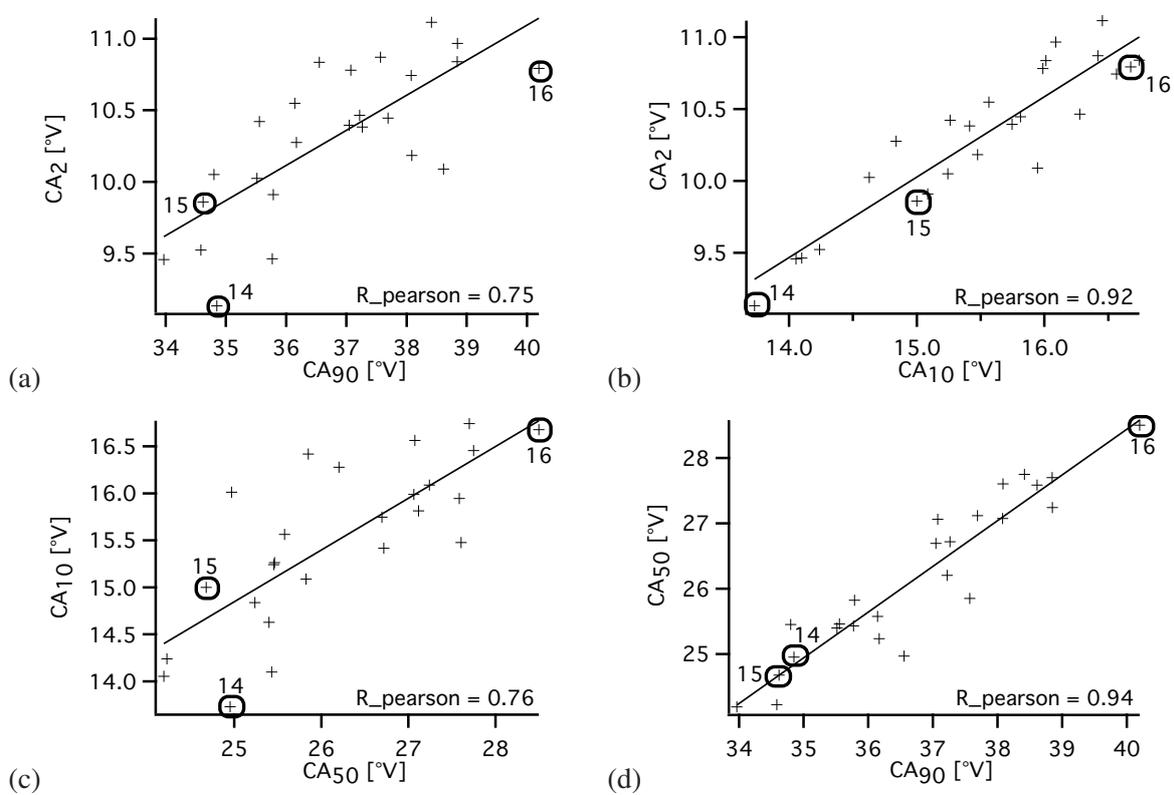


FIG. 9.21 - Corrélations entre les différentes phases de combustion.

cycle suivant.

La masse de GBR, dont la Fig. 9.5(b) montre de faibles variabilités cycliques (masses comprises entre 23.2 et 21.2 mg), peut potentiellement influencer la combustion. Ce taux de GBR montre également à l'AVA une distribution spatiale qui varie (Fig. 9.22) ce qui pourrait influencer la vitesse de propagation dès la phase d'initiation. Cependant, le taux de GBR volumique moyen et le CA_2 ne montre aucune corrélation avec un coefficient de corrélation $R_{\text{pearson}} = 0.2$. Une raison peut venir de la localisation des fluctuations de GBR d'un cycle sur l'autre qui sont plutôt présentes près du piston, et qui de ce fait ne jouent pas sur la vitesse de propagation dans la phase d'initiation. Un autre facteur doit alors conditionner cette phase comme l'illustrent les cycle 15 et 16 : ils révèlent des taux de GBR similaires à la bougie et ont pourtant un comportement complètement différent dans la croissance de flamme (cf. Fig. 9.19).

La température pourrait être à la vue des champs à la bougie avant allumage (Fig. 9.22) un bon candidat pour expliquer les variations de la phase d'initiation : une température de gaz frais plus élevée mène dans la phase de propagation sphérique laminaire à une vitesse de flamme plus élevée. Cependant cet effet n'est pas prépondérant comme le montre le cycle 16, qui possède la température la plus forte à la bougie à l'avance à l'allumage et qui mène pourtant à l'initiation de flamme la plus lente des trois cycles.

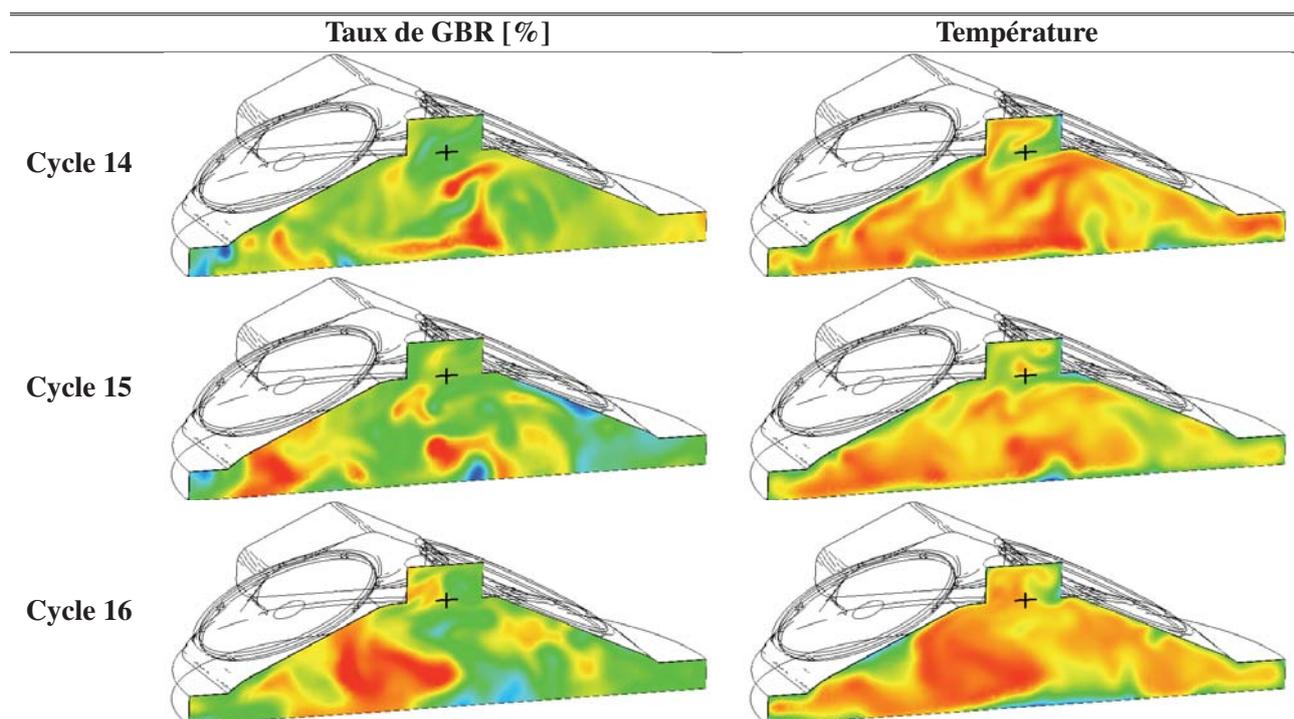


FIG. 9.22 - Facteurs de VCC à l'allumage : champs du taux de gaz brûlés (bleu : 0.08 → rouge : 0.15 %) et de température (bleu : 600 → rouge : 770 K) à l'angle d'allumage ($-20^\circ V$). La position de la bougie est représentée par une croix.

En ce qui concerne la dynamique de l'écoulement, deux sources de variations dans l'initiation de la flamme sont à examiner :

- la turbulence qui va jouer sur la vitesse de flamme,
- l'écoulement moyen qui peut convecter le noyau d'allumage.

L'écoulement "moyen" doit être compris comme le champ de vitesses instantané SGE pour un cycle donné. La "turbulence" est comprise comme la turbulence de sous-maille non résolue par la SGE. On voit ici l'intérêt de la SGE qui permet de différencier ces deux grandeurs. Dans un calcul RANS, tous les cycles auraient la même vitesse "moyenne" car moyennée sur un grand nombre de cycles : toutes les fluctuations seraient contenues dans la "turbulence" (l'énergie cinétique totale).

La turbulence de sous-maille est créée en grande partie par l'explosion du tumble aux instants proches du PMH ce qui a pour effet d'augmenter le plissement de la flamme et ainsi d'accélérer la propagation turbulente de la flamme. A l'instar de l'étude proposée par Vermorel *et al.* [160], cette intensité turbulente peut être reliée à la décroissance de l'intensité du tumble suivant la direction y , direction qui porte le principal axe de rotation du fluide étant donné la géométrie des tubulures d'admission. Avec cette approche, le niveau de turbulence est considéré comme étant d'autant plus intense au moment de l'allumage que la décroissance de l'intensité du tumble est importante. Ce tumble est quantifié par un nombre sans dimension défini comme suit :

$$T_y = \frac{1}{2\pi\Omega_{\text{RPM}}} \frac{\int_V \rho(\mathbf{GM} \wedge \mathbf{U}) \cdot \mathbf{y} \, dv}{\int_V \rho \|\mathbf{GM} \wedge \mathbf{y}\|^2 \, dv}, \quad (9.9)$$

où G est le centre de masse, \mathbf{U} le vecteur vitesse au point M et V le volume de la chambre de combustion.

La figure 9.23(a) montre l'évolution de T_y pour les cycles 14,15 et 16 ainsi que l'enveloppe des cycles SGE. Cette dernière dénote une plage de variation non négligeable de T_y avec une évolution semblable pour tous les cycles. La décroissance du tumble est alors évaluée par la différence entre l'intensité maximum du tumble T_y^{max} et son intensité à l'AVA T_y^{AVA} : $\Delta T_y = T_y^{max} - T_y^{AVA}$.

La figure 9.23(b) montre que l'explosion du tumble n'est pas liée aux VCC puisque aucune corrélation apparaît entre la rapidité de l'initiation de flamme et la décroissance du tumble. Il est également intéressant de noter qu'il n'y a pas de lien entre l'intensité du tumble à l'allumage et la rapidité de l'initiation (Fig. 9.23(a)). Pour exemple, le cycle 14 possède l'initiation la plus rapide des 3 cycles avec le plus faible niveau de tumble T_y à l'allumage.

La topologie de l'écoulement moyen à la bougie au contraire de tous les autres paramètres semble jouer un rôle prépondérant dans l'initiation de la flamme. La figure 9.24 montre, pour chacun des trois cycles, les vecteurs vitesse à l'AVA dans le plan de symétrie du moteur (ce plan passe par la position de la bougie localisée par une croix) ainsi que le noyau de flamme qui résulte de cette dynamique $5^\circ V$ après l'allumage. La comparaison dénote clairement l'importance du mouvement de tumble résiduel étant donné qu'il conditionne l'endroit où le noyau va se développer. Pour les cycles 14 et 15, le tumble est centré sous le puits de bougie et le noyau de flamme est alors convecté sous le toit de culasse du côté échappement. Pour le cycle 16, le tumble est décalé du côté échappement et le noyau est alors contraint à se développer dans le puits de bougie ce qui le ralentit.

Les conséquences de cette position initiale du noyau sont alors doubles :

- dans le puits de bougie, l'interaction flamme/paroi est très forte ce qui est propice à des pertes thermiques plus importantes et à des extinctions de flamme locales ;
- la turbulence est moindre sous le puits de bougie que dans le reste de la chambre (voir annexe B).

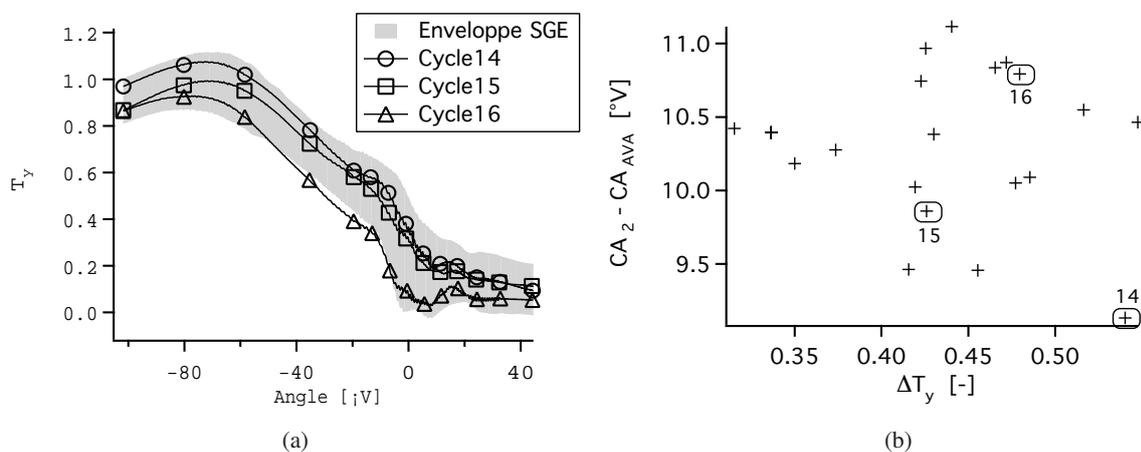


FIG. 9.23 - (a) Evolution du nombre de tumble SGE. (b) Corrélation du CA_2 avec la décroissance du tumble à l'AVA $\Delta T_y = T_y^{max} - T_y^{AVA}$.

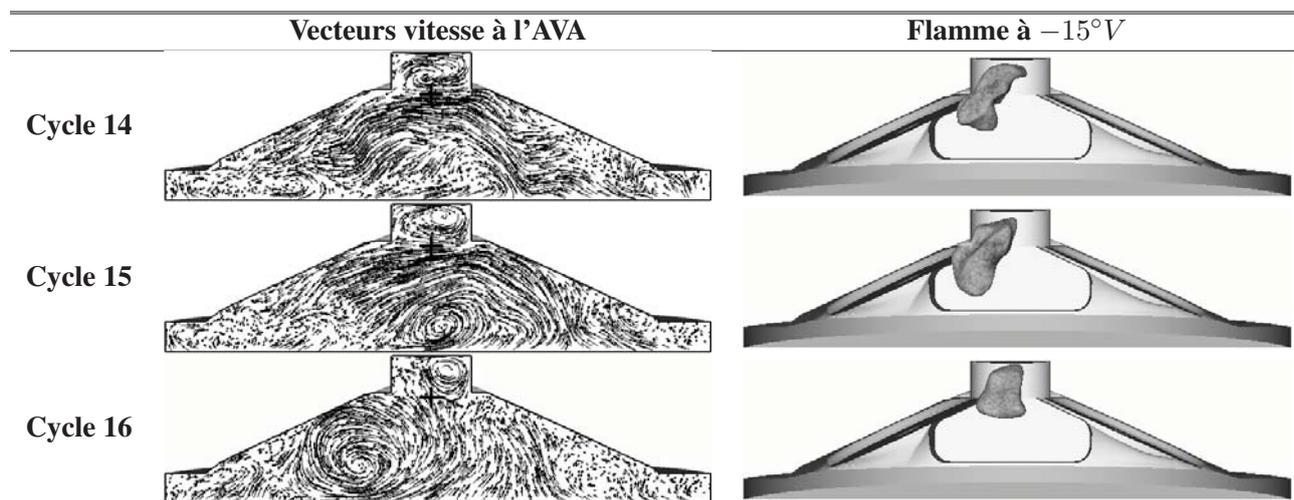


FIG. 9.24 - Champs de vecteur vitesse à l'allumage ($-20^\circ V$) et noyau de flamme qui en résulte $5^\circ V$ plus tard.

Le dernier point est illustré sur la Fig. 9.25(a) où l'évolution de la vorticité conditionnée par la flamme $\|\omega\|_f$ (Eq. 9.10) est tracée au cours de sa propagation.

$$\|\omega\|_f = \frac{\int_V \omega \dot{Q} dv}{\int_V \dot{Q} dv} \quad (9.10)$$

Les cycles 14 et 16 débutent initialement avec un niveau similaire de vorticité puis le cycle 14 voit une augmentation bien plus rapide de la vorticité que celle du cycle 16 dont le noyau de flamme se développe dans le puits de bougie. La figure 9.25(b) montre que la vitesse de consommation turbulente des cycles 14 et 15 dont la flamme se développe sous le toit de culasse du côté échappement est ainsi bien plus élevée.

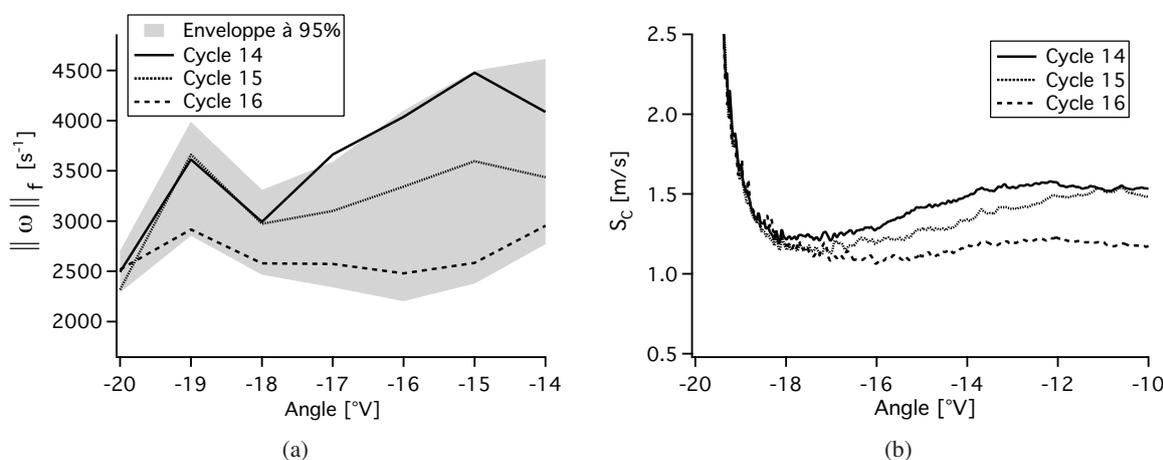


FIG. 9.25 - (a) Vorticité vue par la flamme dans les premiers degrés vilebrequin de sa propagation. (b) Vitesse de consommation turbulente qui en résulte.

Pour résumer, l'écoulement moyen au niveau de la bougie est la principale source de VCC de ce point de fonctionnement en conditionnant l'endroit où le noyau de flamme va se développer. On notera donc que c'est avant tout la différence de vitesse résolue (capturée par la SGE) près de la bougie qui crée les VCC. Ce mécanisme diffère de celui mis en évidence dans la SGE du moteur XU10 réalisée par Vermorel [160] qui désigne comme facteur de VCC l'intensité turbulente à la bougie.

9.4 Conclusion

Grâce à des calculateurs massivement parallèles, la SGE est capable de simuler 26 cycles consécutifs d'un point de fonctionnement stable d'un banc mono-cylindre quasi complet. Le temps d'exécution d'un cycle est évalué à 32 heures sur 400 processeurs d'un cluster SGI Altix ICE 8200. Pour ce point, la combustion, simulée par un modèle de flamme épaissie et une chimie simple à deux étapes, a montré des VCC et a ainsi confirmé le potentiel de la SGE à prédire des variabilités cycle à cycle en reproduisant

correctement le caractère stable du point considéré (variations de 4.7% pour le pic de pression, un écart de type de PMI de 0.025 *bars* soit une covariance de 0.64%). Les investigations des résultats ont permis d'identifier le mécanisme clé des VCC de la phase d'initiation de la flamme : l'écoulement moyen à l'allumage est ainsi désigné comme le facteur principal des variations de la combustion pour ce point de fonctionnement. Ainsi la SGE est d'autant plus idéale pour décrire les variabilités de ce point que leur mécanisme est piloté essentiellement par les grandes structures de l'écoulement résolues par ce type de simulation.

Pour des résultats encore plus précis, certaines améliorations pourraient être apportées à ce calcul, en particulier pour éviter le léger retard de la SGE dans la propagation de la flamme. Ce retard semble s'initier dès les premiers instants après allumage. Ainsi le modèle d'allumage peut être amélioré en incluant la modélisation des pertes d'énergie du système électrique (type AKTIM [38]). Cette modélisation définirait une énergie et un temps de dépôt plus réalistes que ceux qui sont imposés dans ce calcul. Les électrodes de la bougie pourraient également être maillées pour modéliser les pertes thermiques dès l'initiation de la flamme. Un dernier point très important est la vitesse de flamme laminaire donnée par le schéma cinétique réduit. Dans les premiers instants, une petite erreur sur cette quantité peut avoir un impact important sur la propagation. Il semble donc important de réaliser une étude de sensibilité à ce paramètre.

Malgré ces approximations, cette simulation associée à la base de donnée expérimentale du projet SGE-mac est une première étape dans la démonstration du potentiel de la SGE à prédire des variations cycle à cycle. Des questions demeurent cependant quant à la capacité de la SGE à distinguer un point de fonctionnement stable d'un autre instable (covariance de PMI supérieure à 3%). Ce point est étudié au chapitre suivant. Si la SGE a montré sa capacité à reproduire un cas avec de faibles variations, l'étude du cas *instab_dil* du chapitre suivant devrait permettre de voir si la SGE prévoit aussi un cas à fortes VCC.

Chapitre 10

Simulation d'un point instable du banc F7P

Le chapitre précédent a montré que la SGE est capable de reproduire le caractère stable d'un point de fonctionnement. Il a également permis d'identifier le mécanisme de VCC de l'initiation de la flamme après allumage. Il est alors intéressant d'étudier si la SGE est capable de reproduire un point de fonctionnement de la base expérimentale SGEmac qui présente de plus fortes VCC. Plusieurs stratégies peuvent être envisagées pour les augmenter. La section 1.1 a montré que tous facteurs qui induisent une réduction de la vitesse de flamme amplifient les VCC puisque le délai du développement du noyau d'allumage est prolongé. Une forte dilution du mélange par des gaz inertes fait partie de ces facteurs qui peuvent déstabiliser le point *stab_ref*. Dans ce chapitre, la SGE multi-cycles du point de fonctionnement rendu instable par une forte dilution d'azote, le point *instab_dil*, est présentée. Cette simulation est d'un point de vue numérique en tous points similaire à celle du point stable, hormis pour la chimie qui n'est pas adaptée pour une forte dilution du prémélange.

La section 10.1 présente les caractéristiques du point de fonctionnement simulé en mettant l'accent sur les aspects qui diffèrent du point *stab_ref*. La section 10.2 détaille la mise en place du calcul puis présente les résultats. Dans un premier temps, la convergence du calcul est analysée. Dans un second temps, le comportement de l'acoustique dans les lignes ainsi que l'aérodynamique dans le cylindre sont caractérisées. Ensuite la propagation de la flamme dans la SGE est comparée aux mesures expérimentales, et cette étude est complétée par une analyse des variations cycliques de la combustion rencontrées sur ce point.

10.1 Description du point *instab_dil*

Pour ce point de fonctionnement, la géométrie des lignes ainsi que les paramètres géométriques du moteur tels que la cylindrée, l'alésage et la course restent identiques à ceux du point de fonctionnement *stab_ref* (voir. Tab. 10.1). Le croisement de soupape et le régime moteur sont également inchangés. Ce point de fonctionnement est rendu instable par une dilution du prémélange stoechiométrique air-propane à l'admission par de l'azote. Les débits d'air et de propane par rapport au point *stab_ref* restent inchangés.

Le taux de dilution est fixé à 32.8% en masse.

Afin d'obtenir aucun raté d'allumage dû à la dilution, l'AVA est fixée à 50°V avant le PMH combustion.

Paramètres moteurs :	Alésage	82 mm
	Course	83.5 mm
	Taux de compression	9.9
	Longueur de bielle	144 mm
Point de fonctionnement :	Régime moteur	1200 $tr.min^{-1}$
	AVA	50°V
	Ouverture admission (OA)	350°V
	Fermeture admission (FA)	-120°V
	Ouverture échappement (OE)	120°V
	Fermeture échappement (FA)	-350°V
	$P_{admission}$ moyenne	0.612 bar
	$P_{échappement}$ moyenne	1.015 bar
	Richesse	1
	Taux de GBR	6.3%
	Dilution massique de N ₂	32.8%
	PMI	3.19 bar
	COV _{PMI}	7.61%

TAB. 10.1 - Caractéristiques du moteur et du point de fonctionnement instable par dilution d'azote (*instab_dil*). Les différences avec *stab_ref* sont surlignées en gras. Les degrés vilebrequin sont relatifs au PMH combustion (0°V).

A cette valeur d'AVA, la PMI moyenne est égale à 3.19 bar avec une covariance associée de 7.61%, bien supérieure à la valeur de stabilité seuil de 3%. Comme le montre la figure 10.1(a), l'ajout d'un débit supplémentaire d'azote modifie le niveau moyen de pression de la ligne d'admission avec une valeur de 0.612 bar. La ligne d'échappement oscille autour de 1.015 bar.

Les mêmes diagnostics que ceux réalisés sur le point *stab_ref* sont appliqués sur ce point moteur avec dilution : les pressions admission, cylindre et échappement ont été acquises, et la propagation de la flamme dans la chambre est identifiée par de la LIF-OH (cf. Fig. 9.10).

10.2 Modélisation par SGE

10.2.1 Mise en place du calcul

Maillages

Les caractéristiques des maillages utilisés pour simuler le point *instab_dil* sont les mêmes que celles des maillages utilisés sur le point moteur *entraîné* ou *stab_ref* (voir Tab. 10.2). La géométrie reste maillée

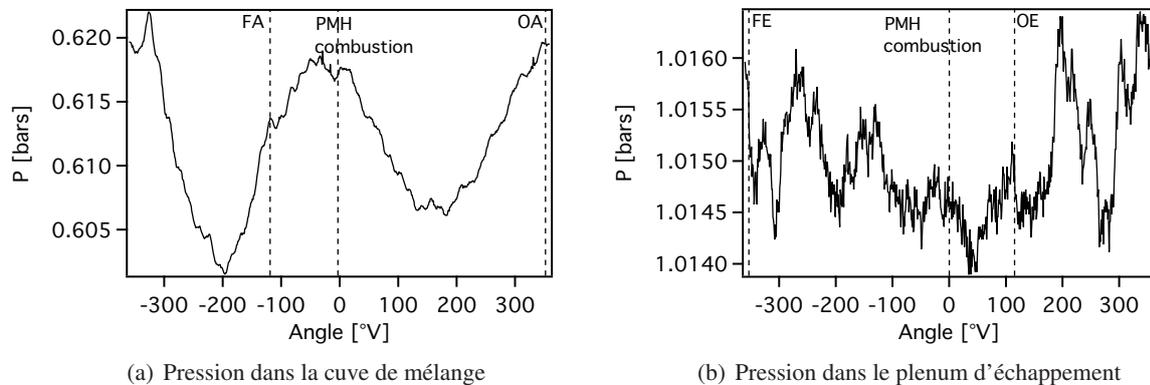


FIG. 10.1 - Pressions moyennes expérimentales dans les deux plenums (admission et échappement) à proximité du moteur

du plenum d'injection de propane au plenum d'échappement. La taille caractéristique dans le cylindre est toujours de 0.8 mm , et pendant la phase de dépôt d'énergie le point d'allumage est raffiné à $\Delta x = 0.2 \text{ mm}$ pour éviter une diffusion des hautes températures dans le noyau. L'AVA intervenant plus tôt dans le cycle moteur, le découpage des phases de maillage du point *stab_ref* n'a pu être reconduit. Des phases de remaillage ont été rajoutées, aboutissant à un total de 43 phases pour réaliser un cycle moteur.

	Nombre de noeuds	Nombre de cellules
OA	1 025 000	5 295 000
PMB	1 108 000	6 142 000
FA	1 770 000	9 580 000
PMH combustion	421 000	2 246 000
OE	1 580 000	8 430 000
FE	812 000	4 013 000
Croisement de soupapes	1 672 000	8 325 000

TAB. 10.2 - Caractéristiques des maillages tétraédriques du point *instab_dil*.

Paramètres des modèles et numériques

Les paramètres des modèles et numériques utilisés pour ce calcul sont résumés dans la Tab. 10.3. Le schéma numérique correspond au schéma Lax-Wendroff ce qui reste identique au point *stab_ref*. Le modèle de sous-maille, un Smagorinsky standard, reste inchangé tout comme les niveaux des viscosités artificielles (viscosité d'ordre 2 et d'ordre 4). Les chocs aux ouvertures soupapes sont appréhendés grâce à la viscosité de volume de Cook et Cabot.

Les paramètres du modèle d'allumage (énergie et temps de dépôt) restent également identiques à

Paramètres	Choix / Valeurs
Schéma numérique	Lax-Wendroff (section 4.2)
Modèle de sous-maille	Smagorinsky (section 3.2) $C_S = 0.18$
Modèle d'allumage (section 6.2)	$\varepsilon_i = 20 \text{ mJ}$ $\Delta_s = 2.5 \text{ mm}$ $\Delta_t = 100 \text{ }\mu\text{s}$
Cinétique chimique	C3H8-BE2-DIL (section 5.2.3)
Modèle de choc	Cook et Cabot (section 4.6.2)

TAB. 10.3 - Paramètres numériques du calcul *instab_dil*.

ceux du point *stab_ref*. L'instant auquel on dépose l'énergie est juste décalé pour correspondre à l'AVA de ce point moteur. Dès le dépôt d'énergie, les mécanismes chimiques sont modélisés via une réaction d'oxydation du propane et un équilibre CO – CO₂. En raison de la forte dilution par N₂, les paramètres de ces deux réactions (énergie d'activation, exposants, pré-exponentielle (section 2.7)) correspondent à ceux du schéma C3H8-BE2-DIL qui prédit une vitesse de flamme laminaire correcte en situation de forte dilution par de l'azote contrairement au schéma C3H8-BE2 (voir section 5.2.3).

Conditions limites et initiale

A chaque plenum du domaine de calcul, les signaux de pression variant dans le temps de la Fig. 10.1 sont imposés avec une méthode caractéristique via la méthodologie décrite sur le point *moteur entraîné*. Les murs sont toujours modélisés par des lois de paroi isothermes. Les valeurs cibles à imposer sont d'une grande incertitude étant donné que les températures de parois n'ont pas été caractérisées dans l'expérience. Pour ce calcul un premier essai a été réalisé en imposant des valeurs de températures de parois issues d'AMESim, identiques à celles imposées dans la SGE du point *stab_ref*. Cette tentative s'est révélée infructueuse pour ce point puisque la masse enfermée dans la cylindre n'était pas bien prédite par la SGE avec un écart de 8.6% par rapport à la masse expérimentale. Retrouver la masse de l'analyse de combustion est un critère primordial pour simuler une combustion semblable à celle du banc moteur. Les valeurs cibles des températures de parois ont alors été fixées pour approcher la masse prédite par l'analyse de combustion $M_{\text{expe}} = 259 \text{ mg}$ (Tab. 10.4).

La simulation est initialisée à l'ouverture admission par une solution issue de la simulation du point *stab_ref*. Les champs de vitesse et de température ont été conservés. La composition du mélange a par contre été changée pour retrouver la dilution massique de 32.8% d'azote. La pression dans la ligne d'admission a également été décalée pour retrouver un niveau moyen de pression de 0.612 bar.

Conditions limites	Description
Entrée du plenum d'admission (plenum d'injection de propane)	Entrée caractéristique : <ul style="list-style-type: none"> • $P_{\text{entrée}} = P(t)$ (Fig. 10.1(a)) , $T = 296K$
Gaz frais à $\Phi = 1$ et dilution massique de N_2 de 32.8%	<ul style="list-style-type: none"> • $Y_{C_3H_8} = 0.04$, $Y_{O_2} = 0.1454$, $Y_{N_2} = 0.8146$ • $Y_{CO_2} = 0$, $Y_{CO} = 0$, $Y_{H_2O} = 0$
Sortie du plenum d'échappement	Sortie caractéristique : <ul style="list-style-type: none"> • $P_{\text{sortie}} = P(t)$ (Fig. 10.1(b))
Bloc moteur	Lois de paroi isothermes à températures constantes $T_{\text{culasse}} = 448 K$, $T_{\text{chemise}} = 440 K$, $T_{\text{culasse}} = 448 K$
Ligne d'admission	Loi de paroi isotherme : <ul style="list-style-type: none"> • Bloc moteur - Diffuseur : gradient de température linéaire • Diffuseur - Plenum de mélange : $T = 300 K$
Ligne d'échappement	Loi de paroi isotherme : <ul style="list-style-type: none"> • Bloc moteur - Collecteur : gradient de température linéaire • Collecteur - Plenum d'échappement : $T = 300 K$
Arrêtes-flamme	Parois couplées en multi-perforation

TAB. 10.4 - Caractéristiques des conditions limites du calcul instab_dil.

10.3 Résultats

10.3.1 Convergence de la SGE

La simulation de ce point couvre 17 cycles consécutifs ce qui correspond à 1.7 s de temps physique. Le temps de restitution d'un cycle moteur correspond à 35 h sur 400 processeurs de la machine SGI Altix ICE 8200 du CINES. Par rapport au point *stab_ref*, la différence correspond à près de 3 h. Ce surcoût de près de 9% provient de la phase de combustion qui dure plus longtemps pour le point *instab_dil* ($\sim 95^\circ V$) que pour le point *stab_ref* ($\sim 45^\circ V$). Pendant cette phase, les températures atteintes dans la flamme augmentent la vitesse du son ce qui a pour effet de diminuer le pas de temps convectif (cf. section 4.3).

La figure 10.2(a) présente l'évolution de la masse enfermée dans le cylindre pour ces 17 cycles consécutifs. On s'aperçoit clairement que les deux premiers cycles sont influencés par l'initialisation puisque ils n'ont pas convergé en masse contrairement aux 15 cycles suivants qui ont une masse voisine de 250 mg, soit 3.5% de différence avec la masse issue de l'analyse de combustion de l'expérience.

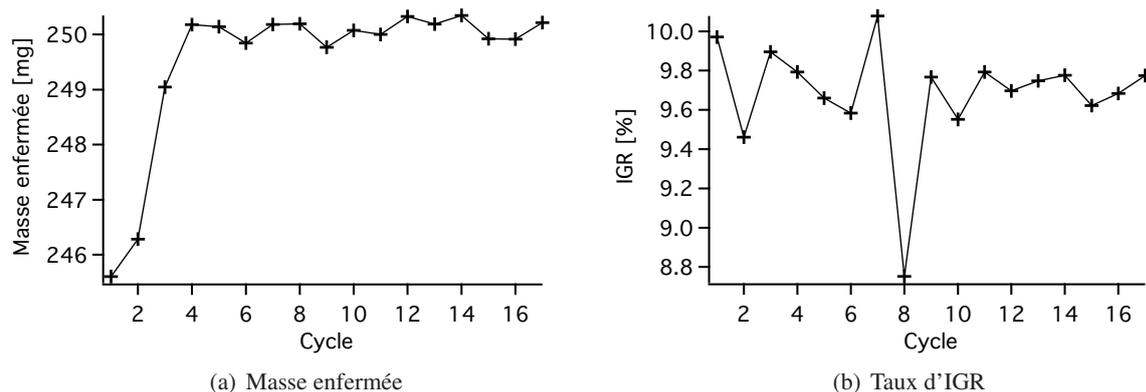


FIG. 10.2 - Evolution de la masse enfermée et du taux de GBR au cours des 17 cycles simulés.

Le taux de GBR est convergé dès le premier cycle avec des valeurs oscillant autour de 9.7% (Fig. 10.2(b)). Ce taux est supérieur à celui donné par l'analyse de combustion (6.3%) comme constaté sur la simulation du point *stab_ref*.

Par la suite, toutes les moyennes d'ensemble de la SGE seront réalisées sur les 15 derniers cycles pour éviter une pollution par les conditions initiales.

10.3.2 Activité des lignes d'admission et d'échappement

La figure 10.3 compare les évolutions de pression du cycle moteur moyen aux différentes sondes expérimentales de la Fig. 9.1(a). Une fois de plus, conformément à ce qui a été observé sur les deux points précédents (*entraîné* et *stab_ref*), le traitement des conditions limites ainsi que la modélisation des

arrêtes-flamme permettent d'avoir un bon accord avec l'expérience malgré l'oscillation haute fréquence de la SGE identifiée comme le mode cinq-quart d'onde de la ligne d'admission.

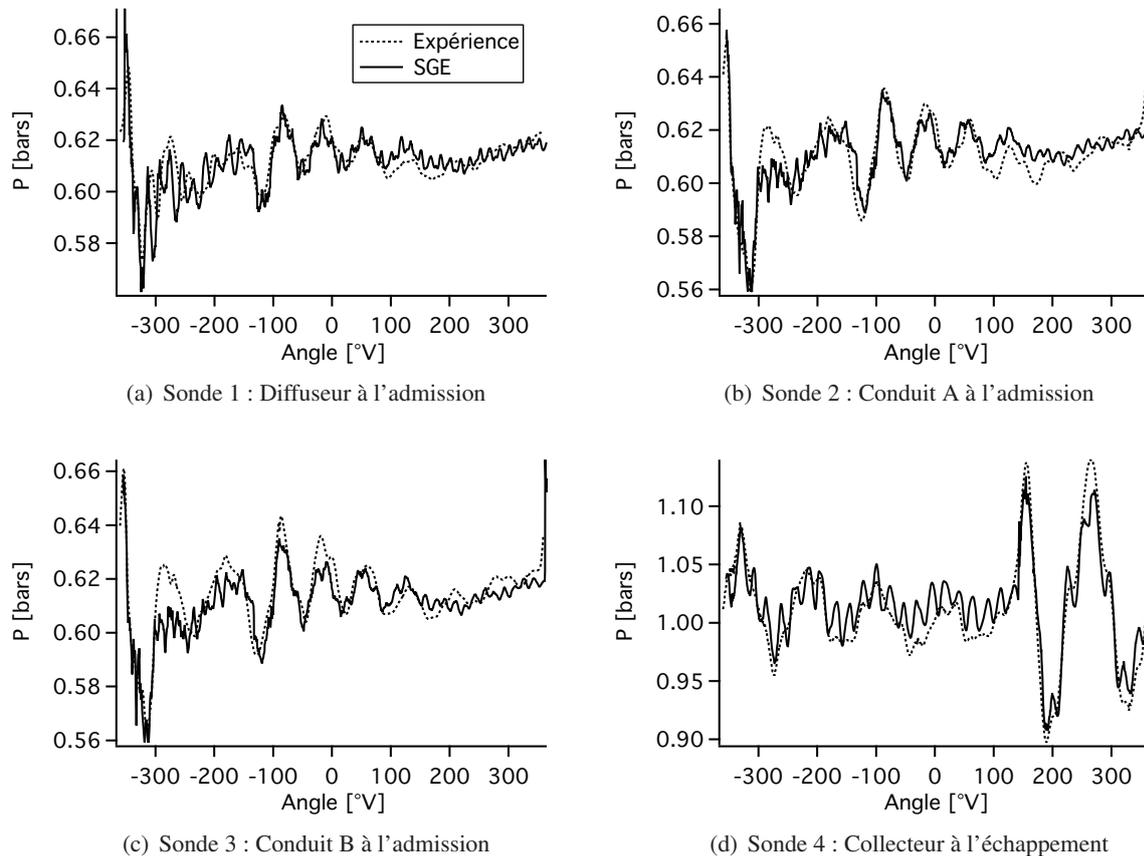


FIG. 10.3 - Pressions moyennes aux différentes sondes placées dans les lignes d'admission et d'échappement.

10.3.3 Aérodynamique dans le cylindre

La figure 10.4 montre une comparaison de l'aérodynamique dans la chambre entre le point *instab_dil* et le point *stab_ref* dans le plan médian entre soupapes. Qualitativement, quelque soit l'angle observé, les structures du tumble de ces deux points de fonctionnement sont très similaires même si le point *instab_dil* est plus chargé (250 mg pour *instab_dil* contre 180 mg pour *stab_ref*). Le tumble est légèrement plus intense pour le point dilué pendant la phase de compression (Fig. 10.4(d)). Cette conclusion se retrouve quantitativement sur la comparaison du nombre de tumble T_y^1 (voir Eq. 9.9) calculé dans le plan médian (Fig. 10.5) qui montre une différenciation du nombre de tumble pendant la compression. Cet écart reste

¹il est à noter que pour cette comparaison G défini à l'Eq. 9.9 n'est plus le centre de masse mais le centre de la chambre

cependant léger et l'intensité du tumble ne peut pas expliquer les différences observées sur les VCC de ces deux points.

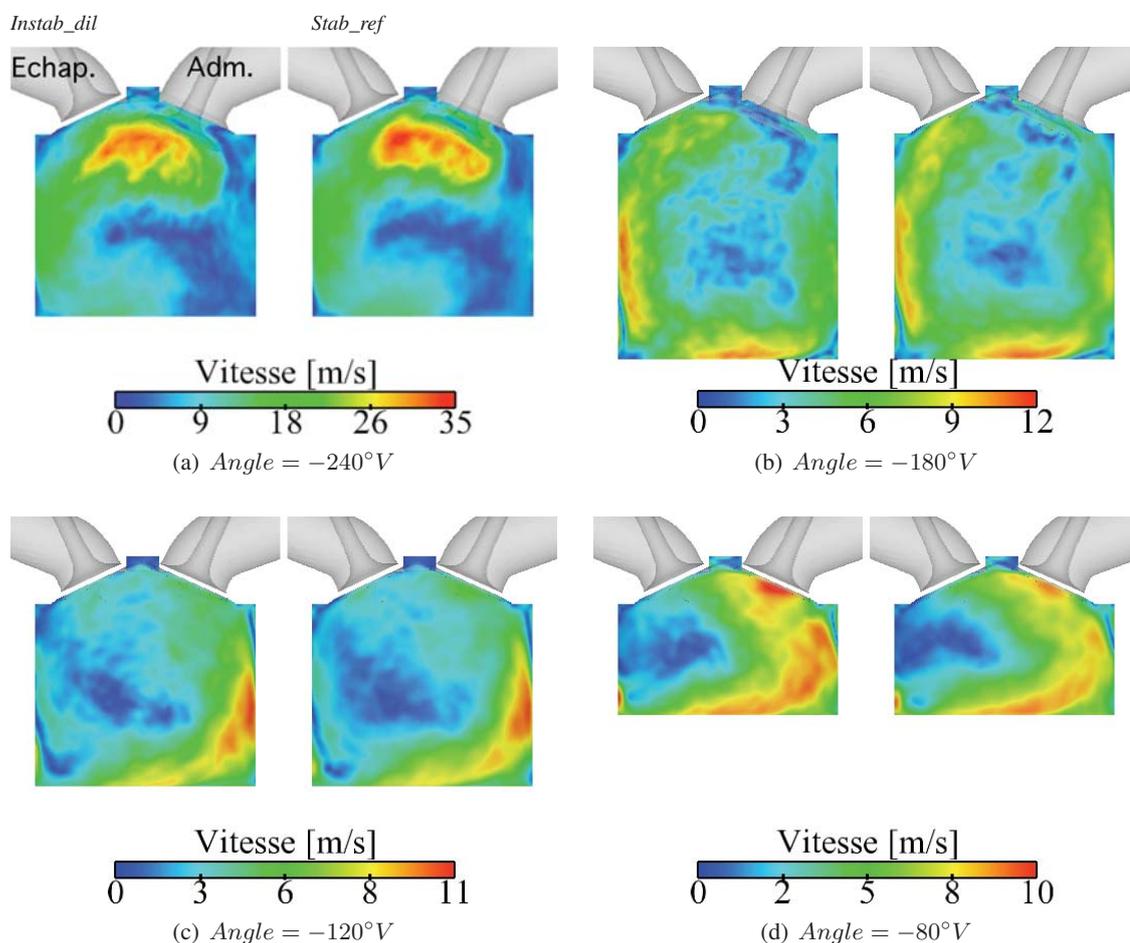


FIG. 10.4 - Magnitude de la vitesse moyenne dans le plan médian entre les soupapes. Comparaison entre les SGE des points *instab_dil* et *stab_ref*.

10.3.4 Analyse de la combustion

Analyse globale de la combustion

De façon similaire à ce qui a été réalisé pour le point *stab_ref* (section 9.3.3), le régime de combustion de ce point de fonctionnement a été placé sur le diagramme de Peters [116] (voir Fig. 10.6). En comparaison au point de fonctionnement stable, le régime de combustion du point instable est décalé vers le haut, ce qui correspond à une diminution du nombre de Damköhler. La dilution a pour effet d'augmenter

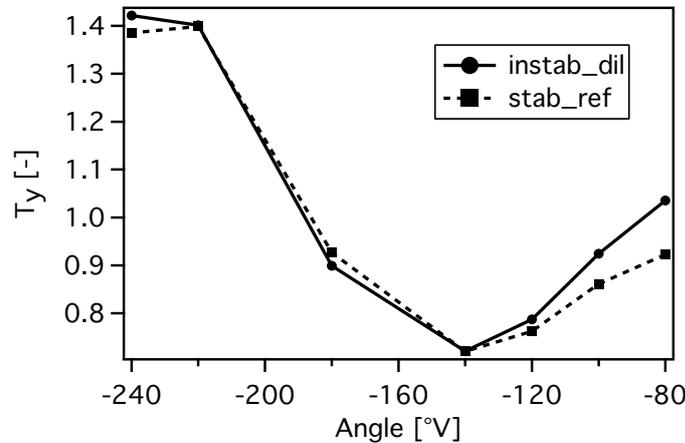


FIG. 10.5 - Evolution du nombre de tumble dans le plan médian entre soupapes.

le temps chimique via la diminution de la vitesse de flamme ce qui rend la flamme plus sensible à la turbulence résolue.

L'analyse a posteriori du régime de combustion du point *instab_dil* montre que le modèle DTFLES reste toujours adapté. La figure 10.7 montre l'activité du modèle DTFLES durant les phases de combustion via l'efficacité E_f et l'épaississement F_f conditionnés par le taux de réaction et définis au chapitre précédent (Eq. 9.6). Ces valeurs instantanées de l'épaississement et de l'efficacité sont issues du cycle 4 dont la pression cylindre est proche de la pression moyenne SGE. On s'aperçoit que ces deux quantités croissent très doucement pendant $\sim 25^\circ V$ après l'allumage. Ceci est en partie dû au raffinement du maillage au niveau du dépôt d'énergie qui permet d'avoir à cet endroit une flamme quasiment résolue. A $-25^\circ V$, l'épaississement et l'efficacité augmentent plus rapidement pour atteindre des valeurs maximums respectives de 18.3 et 3.2. La valeur d'épaississement maximum est bien plus faible que celle obtenue sur le point *stab_ref* qui était de l'ordre de 70, soit environ 4 fois plus grande. Ceci est cohérent avec le fait que la résolution des maillages n'a pas changé entre les deux points de fonctionnement alors que l'épaisseur de flamme a augmenté d'un facteur 4 comme le montre la Fig. 10.6.

Structure moyenne de la flamme

La comparaison de présence de flamme entre les champs moyens de la SGE et des essais réalisée en section 9.3.3 pour le point *stab_ref* a été reconduite pour ce point moteur (Fig. 10.8). Les différences entre la moyenne expérimentale sur 150 cycles et la SGE sont bien plus marquées que celles observées sur le point stable : l'intensité de la présence de flamme issue de la simulation est moins forte et la flamme est présente sur une partie plus restreinte de la fenêtre 2D de comparaison.

Si l'on s'intéresse aux LIF-OF individuelles des essais, elles présentent de multiples zones de réactions séparées qui varient spatialement d'un cycle sur l'autre, et non une zone franche de réaction comme pour le cas stable. Un nombre de cycles plus important doit donc a priori être réalisé pour obtenir une conver-

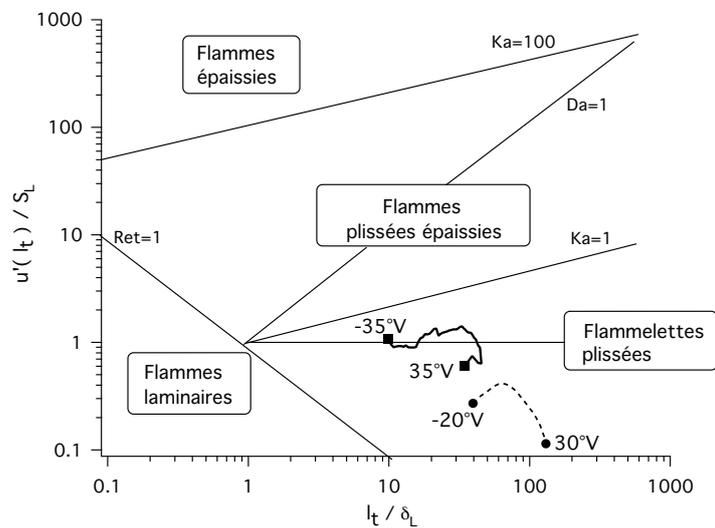


FIG. 10.6 - Comparaison des régimes de combustion du point stable *stab_ref* (---) et du point instable *instab_dil* (—) sur le diagramme de Peters [116].

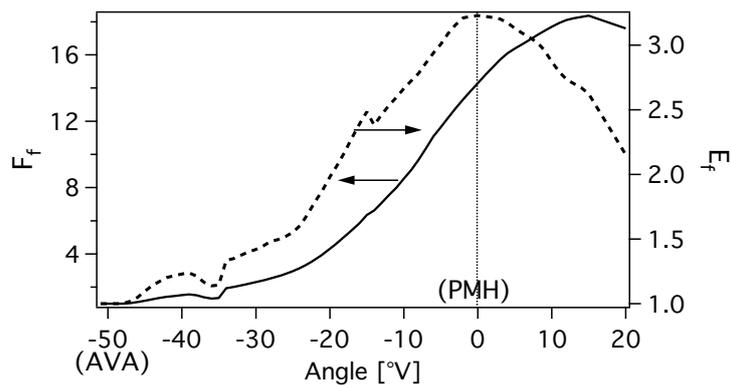


FIG. 10.7 - Evolutions des facteurs d'épaississement F_f (—) et d'efficacité E_f (---) obtenus au cours de la combustion du cycle 4.

gence satisfaisante de la présence de flamme. La représentativité de l'échantillon statistique SGE a alors été testée étant donné le faible nombre de cycles simulés pour ce point moteur. Pour ce faire, une présence de flamme est obtenue à partir de 15 cycles consécutifs expérimentaux. Cette présence de flamme montre des niveaux bien plus comparables à ceux observés sur les champs SGE. Les topologies des présences de flamme sont également plus cohérentes même si la flamme SGE est plus décalée du côté échappement. Ces résultats indiquent que la SGE rend compte d'une propagation de flamme similaire à celle des essais mais le nombre de cycles simulés est clairement insuffisant pour rendre compte du comportement moyen de la flamme. Une étude de convergence menée à partir des résultats expérimentaux montre que la topologie de présence de flamme obtenues sur 150 cycles est retrouvée à partir de 40 cycles. Ce nombre de cycles nécessaire pour retrouver la topologie moyenne présage de VCC spatiales de la combustion bien plus prononcées que celles observées sur le point stable puisque 25 cycles suffisaient alors pour évaluer correctement la présence de flamme moyenne.

10.3.5 Indicateurs globaux de variations cycle à cycle

Pression cylindre

La figure 10.9(a) montre une comparaison de l'évolution temporelle de la pression cylindre entre la SGE et les mesures expérimentales. Les pression moyennes ainsi que les enveloppes contenant 95% des cycles sont tracées. L'enveloppe et la moyenne SGE montrent un décalage vers le haut en comparaison à l'expérience. Comme le montre la Fig. 10.9(b), cet écart provient d'une surestimation de la pression pendant la phase de compression. Deux raisons peuvent expliquer cette tendance de la pression par la SGE :

- la combustion simulée est plus rapide dès l'initiation de la flamme.
- le taux de compression de la simulation ne rend pas compte des effets de blowby rencontrés sur ce point moteur.

Pour étudier le premier point, une compression isentropique partant de la pression de l'AVA du cycle moyen SGE a été superposée aux courbes de pression moyenne (Fig. 10.9(b)). La pression issue de la compression isentropique surestime également la pression moyenne expérimentale sur plus de $20^\circ V$, indiquant que la combustion n'est pas la cause du décalage entre la simulation et l'expérience. Le dégagement de chaleur moyen de la SGE est également très faible pendant les 30 premiers degrés vilebrequin après l'AVA. Or à $-25^\circ V$, la pression moyenne SGE surévalue déjà de 0.3 bar la pression moyenne expérimentale ce qui tend à confirmer le deuxième point, c'est à dire un problème sur le taux de compression également observé pour le point moteur *entraîné*.

Mis à part cet écart, la plage de variation de la combustion est similaire entre l'expérience et la SGE. L'écart type du maximum de pression est de 2.64 bar pour la SGE contre 2.32 bar pour l'expérience ce qui correspond en relatif à leur pression moyenne maximale à 14.1% et 14%. Cette similarité sur la variabilité est soulignée en traçant la pression cylindre maximum du cycle $i + 1$ en fonction de celle du cycle i (Fig. 10.10(a)). Pour la SGE comme pour l'expérience, aucun motif n'apparaît soulignant qu'aucune cohérence ne ressort entre un cycle moteur et le précédent.

La pression cylindre permet également de comparer le phasage et la rapidité de la combustion entre la SGE et l'expérience. Pour cela, la pression cylindre maximale est tracée en fonction de l'angle vilebre-

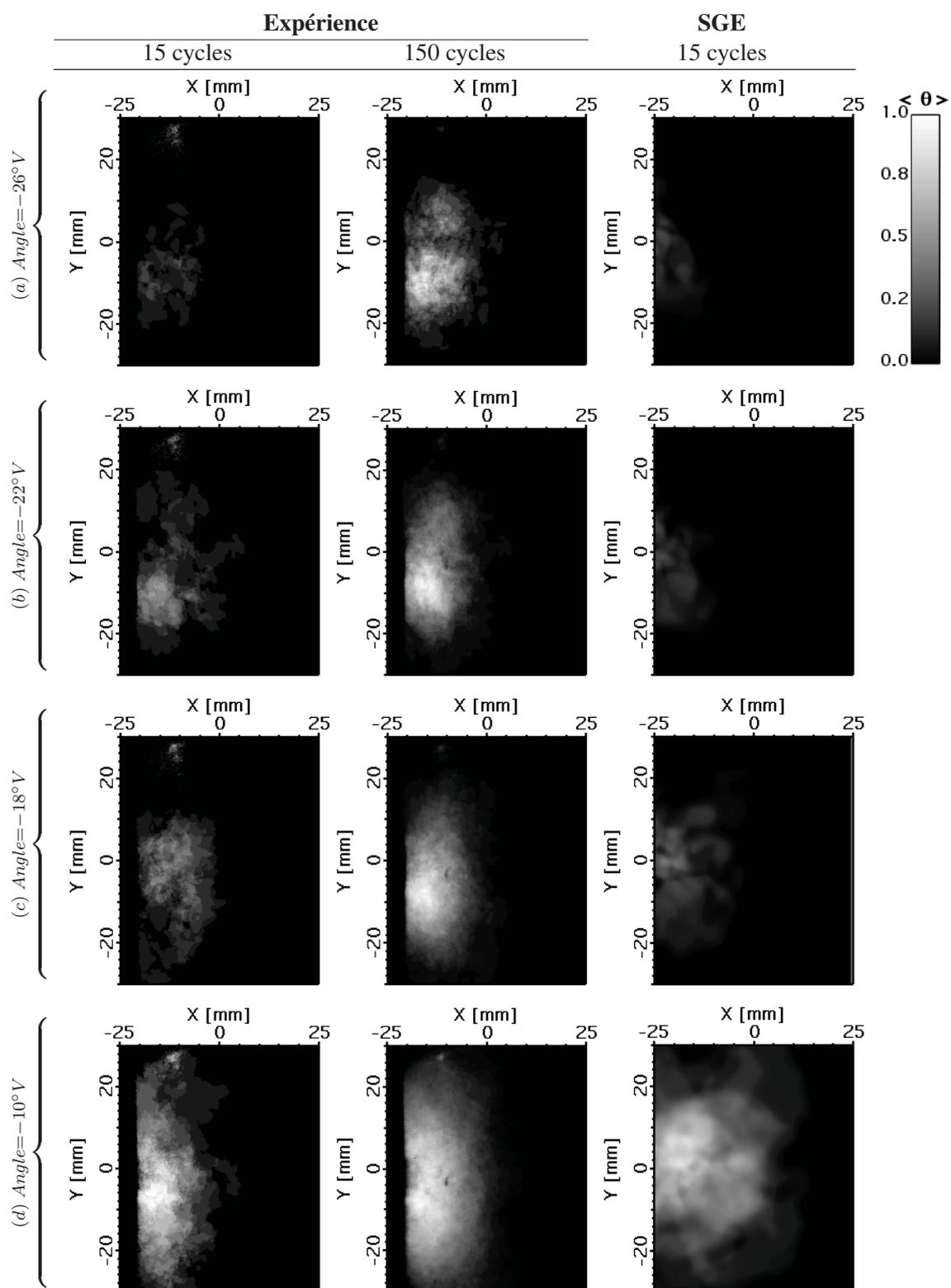


FIG. 10.8 - Comparaison de la présence de flamme entre la SGE et l'expérience dans un plan situé à 8 mm sous la bougie.

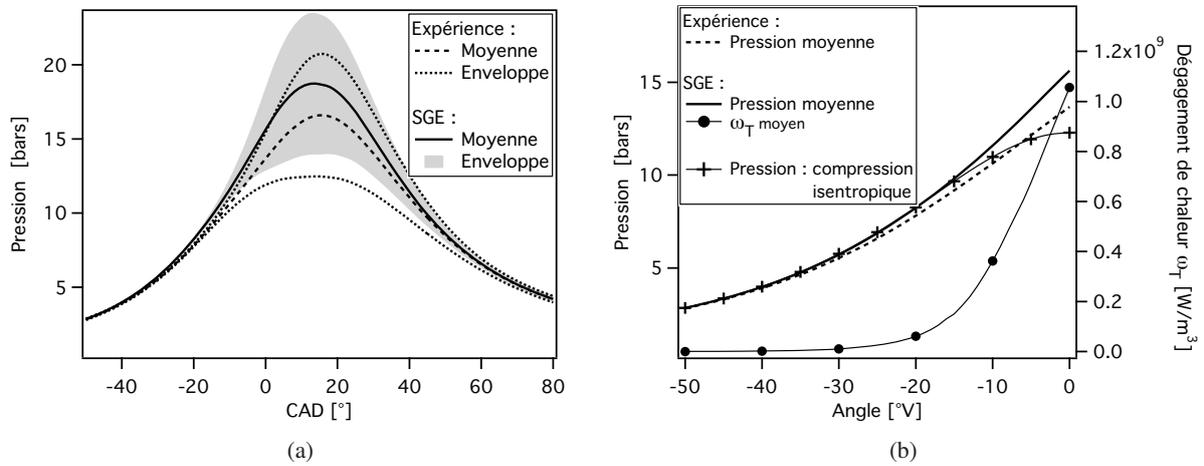


FIG. 10.9 - (a) Comparaison des évolutions de pression cylindre. (b) Zoom sur la compression.

quin de pression cylindre maximum $CA_{P_{max}}$ (Fig. 10.10(c)). Sur ce diagramme proposé par Matekunas [97] et illustré en Fig. 10.10(b), le maximum de la pression expérimentale montre une forme d'arc caractéristique. Ce comportement non linéaire de la pression est également retrouvé par la SGE. La moitié des cycles simulés, dont le $CA_{P_{max}}$ est compris entre 10 et 14°V, se trouvent sur l'arc typique des combustions lentes du diagramme de Matekunas. En comparaison, pour le point *stab_ref*, l'expérience comme la SGE se situent dans la partie linéaire du diagramme de Matekunas caractéristique de combustions rapides.

Ces comparaisons sont évidemment encourageantes dans une perspective de prédiction des variabilités cycle à cycle par la SGE. Cependant, elles sont à modérer avec un nombre de cycles simulés assez faible (15) pour un point instable.

PMI et Covariance de la PMI

L'insuffisance du nombre de cycles simulés se retrouve sur les statistiques de la PMI : la moyenne et l'écart type. La figure 10.11(a) montre une fois de plus que 15 cycles ne permettent pas d'atteindre une convergence de ces deux quantités, cependant ce nombre est acceptable pour donner des valeurs proches de celles qui seraient obtenues sur un nombre de cycles plus représentatif. Ainsi, la moyenne obtenue par 15 cycles SGE est de 3.69 bar, valeur qui surestime de 15% la moyenne expérimentale (3.19 bar). Cette surestimation provient de la surévaluation de pression pendant la phase de compression. En terme de covariance de la PMI, la SGE et l'expérience présente également une différence similaire à celle obtenue pour la PMI moyenne avec des valeurs respectives de 5.84% et 7.61%. Cependant, il est important de noter que le caractère instable de ce point ($COV_{PMI} > 3\%$) est retranscrit par la SGE.

L'évolution cyclique de la PMI (Fig. 10.11(b)) ne présente aucune convergence vers un cycle unique, toutefois trois catégories de cycles peuvent être identifiées :

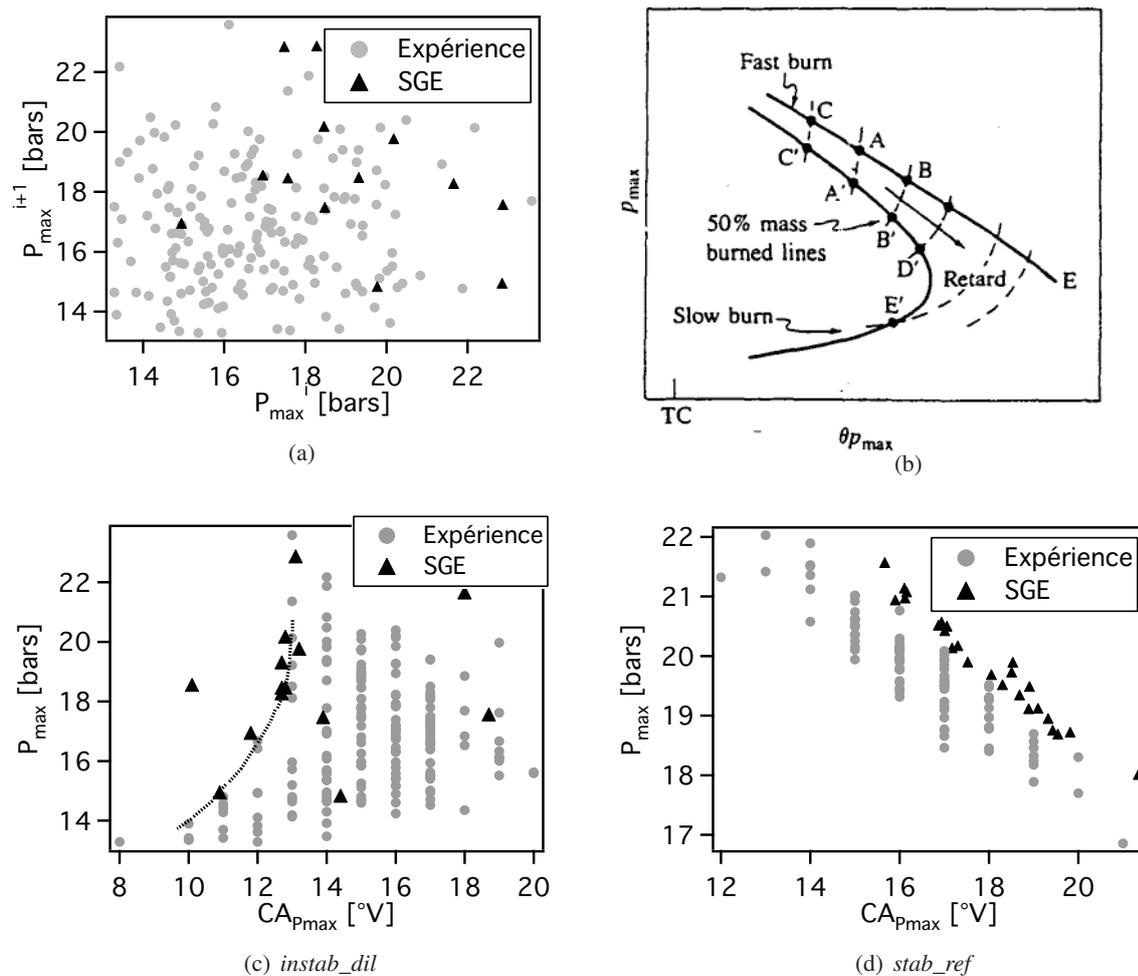


FIG. 10.10 - (a) Pression cylindre maximum du cycle $i + 1$ en fonction de la pression cylindre maximum du cycle i . (b) Diagramme proposé par Matekunas [97] qui schématise la variation du maximum de pression en fonction de son angle d'occurrence. (c) et (d) représente la pression cylindre maximale en fonction de l'angle de pression cylindre maximale respectivement pour le point *instab_dil* et le point *stab_ref*.

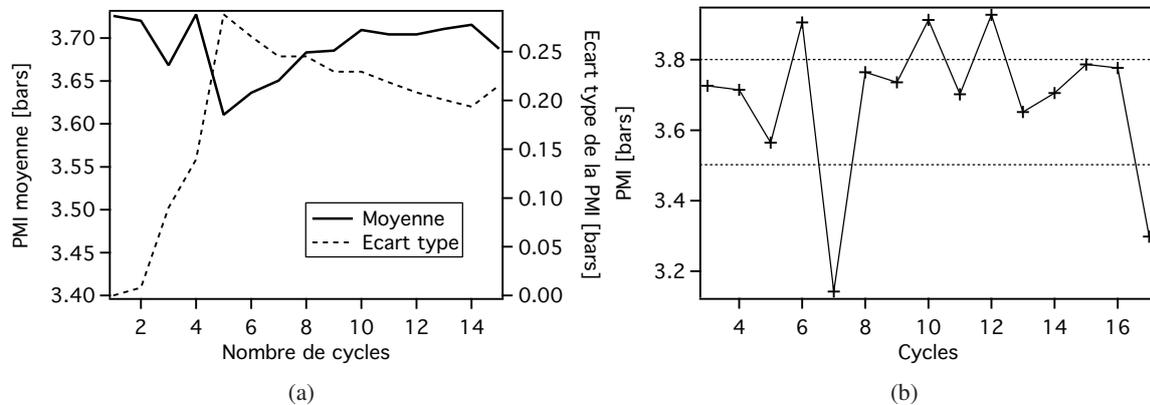


FIG. 10.11 - (a) Convergence de la SGE pour la moyenne de la PMI et son écart type sur n cycles. (b) PMI des 15 cycles SGE.

- les cycles dont la PMI est supérieure à 3.8 bar ;
- les cycles dont la PMI est comprise entre 3.5 et 3.8 bar ;
- et les cycles dont la PMI est inférieure à 3.5 bar.

Par la suite, pour analyser les causes possibles de VCC, les cycles 5, 6 et 7 appartenant à chacune des classes définies ci-dessus sont étudiés. Ces 3 cycles caractéristiques d'une combustion intermédiaire, rapide et lente présentent des valeurs de pression cylindre maximum très différentes qui sont respectivement 17.48 bars, 22.85 bars et 14.95 bars.

10.3.6 Sources des variations cycle à cycle

L'évolution de la surface de flamme résolue (aire de l'iso-surface de la variable d'avancement $\Theta = 0.5$) des 3 cycles sélectionnés en section 10.3.5 est présentée sur la Fig. 10.12. La surface grise représente l'enveloppe de confiance à 95% des cycles SGE. Les phases de combustion déterminées précédemment sur le point stab_ref par les CA_X sont également soulignées sur ces surfaces de flamme.

Des différences de vitesse de combustion sont observées dès les dix premiers degrés après l'allumage. Les cycles 5 et 6 croissent très rapidement avec la même tendance dans la phase d'initiation. Ils commencent à se différencier à partir du CA_2 , et cette différence devient flagrante à partir du CA_{10} où le taux de croissance de la surface de flamme du cycle 5 diminue contrairement au cycle 6. Le cycle 7, le plus lent des trois, se différencie dès la phase d'initiation avec un écart de $4.5^\circ V$ sur le CA_2 .

Pour ce point de fonctionnement, la phase d'initiation semble une fois de plus avoir un rôle prépondérant dans les VCC. Sur l'ensemble des cycles, un cycle qui brûle rapidement dès cette phase mène généralement à un cycle situé dans la partie haute de l'enveloppe de pression comme le confirme la bonne corrélation ($R_{\text{Pearson}} = 0.8$) entre la pression cylindre maximum et le CA_2 .

La corrélation entre le CA_2 et le CA_{10} montre une dépendance quasi linéaire de ces deux indicateurs ($R_{\text{Pearson}} = 0.96$) indiquant que la phase de propagation "libre" n'introduit pas de sources supplémen-

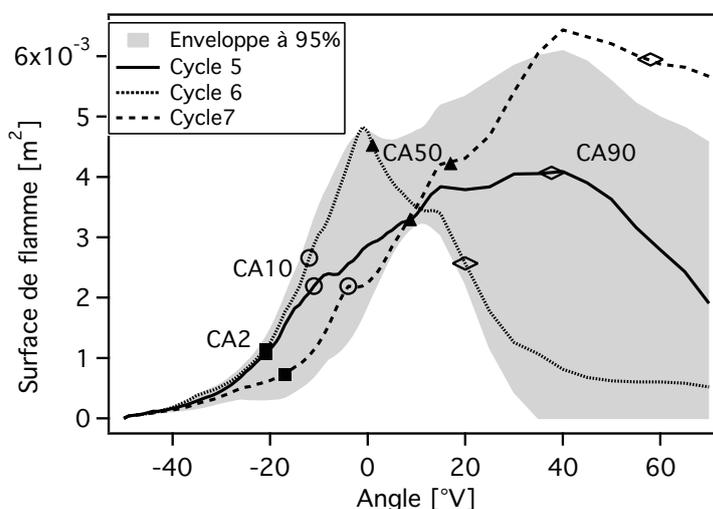


FIG. 10.12 - Evolution des surfaces de flamme résolue (les symboles représentent les CA_X).

taires. Par la suite, quand brûle la majeure partie de la masse, la tendance initiale est conservée puisque le CA_{90} corrèle également bien avec le CA_{10} ($R_{\text{Pearson}} = 0.79$).

Variations cycliques de la phase d'initiation : séparation de la flamme en deux parties

Pour ce point, des tentatives de corrélation entre le taux de GBR à la bougie, la température à la bougie et la rapidité de l'initiation de la combustion (CA_2) n'ont pas révélé de tendance significative.

Comme pour le point *stab_ref*, le paramètre majeur pour les VCC pendant la phase d'initiation est la dynamique de l'écoulement qui pilote la convection du noyau. Sur la figure 10.13, l'évolution spatiale du noyau (iso-surface de la variable d'avancement $\Theta = 0.5$) ainsi que le champ de vitesse dans le plan de symétrie entre les soupapes sont tracés pour quatre angles successifs compris entre l'AVA et le CA_2 . Pour chacun des 3 cycles identifiés dans la section précédente, le noyau de flamme est convecté par le tumble du côté échappement et il se scinde en deux parties entre $-40^\circ V$ et $-35^\circ V$. Une partie brûle dans le puits de bougie et l'autre est convectée sous le toit de culasse du côté échappement. C'est cette seconde partie qui présente le plus d'intérêt puisque son évolution diffère entre chaque cycle. En effet, elle est fortement conditionnée par la position du tumble dans la chambre. Pour le cycle 7, celui dont la combustion est la plus lente, le centre du tumble est situé du côté échappement en proche paroi de la culasse. Le noyau de flamme est alors forcé très rapidement à avoir une forte interaction avec le toit de culasse, ce qui est propice à des pertes thermiques importantes et une extinction locale de la flamme. Par la suite la flamme est convectée vers la zone de squish ; cependant son développement est fortement contraint par la position du tumble.

Une dynamique similaire à celle du cycle 7 est observée pour le cycle 5. Cependant le centre du tumble est moins proche du toit de culasse : l'interaction entre la flamme et la paroi est diminuée et la surface du noyau de flamme est ainsi plus élevée (Fig. 10.12). La flamme est également plus rapidement convectée

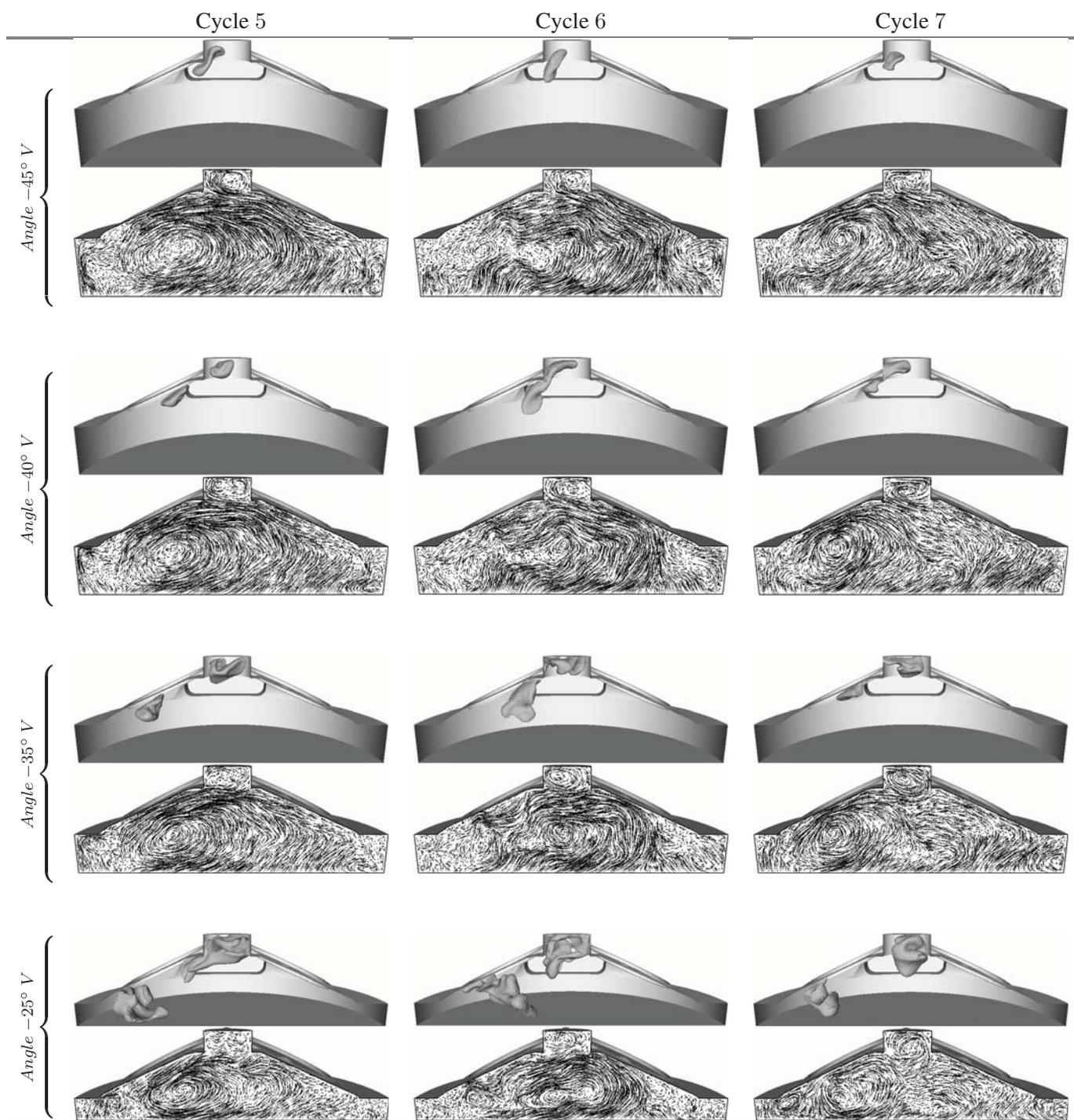


FIG. 10.13 - Visualisation du noyau de flamme et du champ de vitesse dans le plan médian entre les soupapes pour quatre angles successifs relatifs au PMH combustion ($-45^\circ V$, $-40^\circ V$, $-35^\circ V$ et $-25^\circ V$).

vers la zone de squish, zone à forte intensité turbulente ($Angle = -35^\circ V$). A l'angle $-25^\circ V$, la propagation de flamme reste tout de même fortement contrainte par la position du tumble.

Contrairement à ces deux cycles, le cycle 6 dont la propagation est la plus rapide montre un tumble centré sous le puits de bougie. Dès les deux premiers angles ($-45^\circ V$ et $-35^\circ V$) l'interaction avec la paroi est réduite et la surface de flamme est légèrement plus grande que celle du cycle 5 (Fig. 10.12). Comme les autres cycles, la flamme est ensuite convectée vers la zone de squish mais son volume de développement est beaucoup moins réduit grâce cette position centrée du tumble ($-45^\circ V$). La surface de flamme est alors plus grande ce qui favorise l'échange avec les gaz frais. Ceci est illustré par la Fig. 10.14 qui montre l'évolution de la vitesse de consommation (Eq. 9.5). A $-25^\circ V$, quand la flamme se positionne vers la zone de squish, les cycles 5 et 6 montrent des niveaux similaires de vitesse de flamme puis pendant les $5^\circ V$ qui suivent ils se différencient très rapidement.

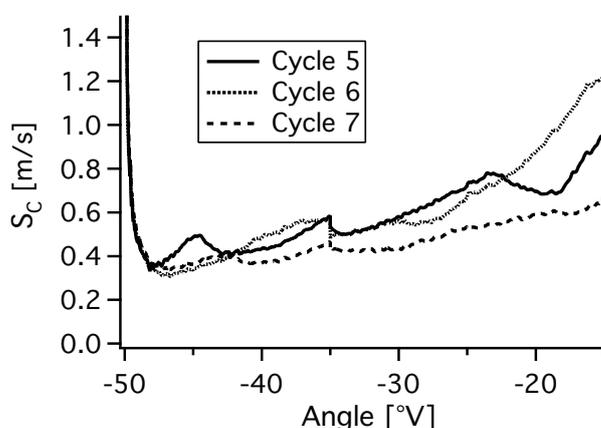


FIG. 10.14 - Evolution de la vitesse de consommation turbulente (Eq. 9.5).

10.4 Conclusion

Le point de fonctionnement instable par dilution a été simulé par SGE en suivant la même méthodologie que celle utilisée pour la simulation du point stable. Même si le nombre de cycles simulés est faible, cette méthode de simulation a confirmé le potentiel observé précédemment sur le point stable. La nature instable de ce point a été retrouvée sur deux indicateurs :

- la variation relative du pic de pression à la pression moyenne maximum est de 14.1% pour la SGE contre 14% pour l'expérience ;
- la covariance de la PMI SGE est de 5.84% comparée à la valeur de 7.61% identifiée dans l'expérience.

Des investigations de ces VCC ont montré que pour obtenir une combustion rapide sur ce point de fonctionnement, le tumble à l'AVA devait être centré sous le puits de bougie pour minimiser l'interaction flamme/paroi. D'autres sources doivent également participer à la rapidité de la combustion (dilution

locale, turbulence, inhomogénéités de température). Cependant, prises de manière indépendantes, une source n'a pas émergé puisque le rendu d'une combustion provient d'une combinaison de ces sources.

La poursuite de l'analyse numérique de ce point instable requiert néanmoins certains approfondissements. D'une part, un plus grand nombre de cycles devraient être simulés pour retrouver le comportement moyen de la combustion de l'expérience. Une analyse de convergence réalisée sur les champs LIF-OH indique que 40 cycles est un échantillon statistique suffisamment représentatif pour ce point de fonctionnement. D'autre part, une attention particulière doit être portée aux transferts thermiques pariétaux qui jouent sur le remplissage du moteur. Une solution de couplage entre le code SGE et un code de thermique pourrait être envisagée. Cependant une stratégie de couplage doit être mise en place avec une validation de cette dernière par un banc moteur spécifiquement caractérisé. C'est l'intention du projet ANR ICAMDAC monté actuellement par l'IFP.

Conclusion générale

L'objectif de ces travaux de thèse a consisté à évaluer le potentiel de la simulation aux grandes échelles (SGE) dans la prédiction des variations cycle à cycle (VCC) d'un moteur à allumage commandé. Pour ce faire, le banc moteur mono-cylindre F7P, du projet ANR SGEmac dédié à l'étude des VCC, devait être simulé dans sa quasi intégralité. L'étude s'est tout d'abord orientée vers la mise au point d'une méthodologie pour pouvoir réaliser ce type de SGE. La taille de la configuration a fortement orienté la modélisation du domaine de calcul par des tétraèdres, type d'éléments qui rompt avec ce qui est classiquement utilisé en simulations de moteurs à piston. Ces éléments ont permis d'obtenir des maillages très raffinés localement sans pour autant augmenter dramatiquement le nombre de noeuds et de cellules. Au préalable, les prédictions obtenues par les tétraèdres en géométrie 3D mobile ont été évaluées sur une configuration de moteur simple, celle de Morse *et al.* [104], avant de passer au cas du banc moteur F7P. Pour réaliser la simulation du banc F7P, d'autres points de modélisation ont du être étudiés :

1. le traitement des chocs aux ouvertures soupapes ;
2. une cinétique chimique réduite C_3H_8/Air adaptée à la large plage de pression et température rencontrée en moteur à allumage commandé ;
3. un modèle d'allumage pour initier la combustion.

Chacun des ces points ont fait l'objet de validation dans des cas simples. Pour le premier, il a été choisie d'évaluer les différentes méthodes existantes dans AVBP (viscosité artificielle, viscosité de volume) susceptibles de rendre compatible les schémas centrés et l'apparition de discontinuités sur une configuration de soupape fixe à très faible levée. Ce cas test a alors orienté le choix sur la viscosité de volume de Cook et Cabot [32] qui s'avère efficace pour limiter les oscillations hautes fréquence et peu intrusive. Le deuxième point a été validé au travers de simulations de flammes 1D laminaires avec le code CANTERA. Enfin le dernier point a consisté à reprendre le modèle d'allumage développé par L. Thobois pendant sa thèse et à le valider en comparant la croissance du noyau de flamme induite par le dépôt d'énergie aux mesures expérimentales de la configuration de l'ARC [124] étudiée au Coria.

Après une validation isolée de chacun des points de modélisation, ces derniers ont été intégrés dans des simulations de complexité croissante pour pouvoir converger vers une méthodologie SGE réactive capable d'évaluer les variabilités cycliques de la combustion. La modélisation du domaine de calcul mobile par des tétraèdres et la modélisation des chocs par la viscosité de Cook ont alors été intégrées dans la SGE du banc F7P entraîné (sans combustion). Cette simulation, en comparaison avec un code acous-

tique (solveur de Helmholtz), a tout d'abord montré que la prise en compte du domaine quasi-complet permet de capturer proprement l'acoustique dans les lignes. Elle a également montré la capacité de la SGE multi-cycles à reproduire les quantités moyennes (vitesse) et à capturer des VCC de la dynamique dans le cylindre cohérentes avec celles mesurées expérimentalement. Ces VCC ont été caractérisées spatialement grâce à la décomposition en modes propres ou POD qui a souligné comme d'autres études auparavant [99, 17] les variations associées à la précession du centre de tumble.

Les deux derniers points de modélisation ont été testés dans la simulation d'un point stable du banc moteur, c'est à dire un point où la covariance de la pression moyenne indiquée (COV_{PMI}) est inférieure à 3%. Hormis une propagation de flamme légèrement plus lente que ce qui est observé expérimentalement le caractère stable de ce point de fonctionnement a été retrouvé par la SGE sur la pression cylindre maximum. Les sources de variabilités ont alors été étudiées et la simulation a montré que les variations de la combustion résultent principalement du mouvement moyen résolu cycle à cycle à l'allumage.

Pour mettre en perspective la capacité de la SGE à distinguer un point stable d'un point instable, un fonctionnement du banc F7P présentant de fortes variabilités cycliques ($COV_{PMI} > 7\%$) causées par une dilution d'azote a été simulé. La méthodologie SGE validée sur le point stable a été reprise. Le caractère instable a été retranscrit par la SGE sur la covariance de la PMI et sur la variation relative du pic de pression cylindre très similaire à celle de l'expérience. Le mouvement résolu cycle à cycle, qui scinde le noyau de flamme en deux, semble une fois de plus être la source des VCC. Cependant, le calcul du point instable requiert des approfondissements. Il serait ainsi intéressant d'appliquer l'outil POD à la combustion comme réalisé par Roux *et al.* [130] ou Bizon *et al.* [14].

Les simulations réalisées dans cette thèse ont montré que la SGE est un outil numérique très prometteur dans les prédictions des variations cycle à cycle observées en moteur à allumage commandé. Cet outil est d'autant plus adapté qu'il a la capacité de résoudre explicitement les structures turbulentes à l'allumage identifiées comme responsable des VCC sur les deux points réactifs simulés. Toutefois, cet outil engendre des coûts de calcul relativement élevés qui sont appréhendés grâce aux machines massivement parallèles. Si pour un point stable, les statistiques de l'écoulement sont obtenues avec un nombre de cycle consécutifs relativement raisonnable (25 cycles), la simulation de points instables requiert un nombre de cycle plus important (~ 40 cycles) ce qui peut devenir un facteur limitant.

Ce travail appelle également à améliorer la modélisation de certains phénomènes tels que :

- l'allumage : le modèle de dépôt d'énergie demande comme entrée la durée du dépôt et l'énergie réellement déposée dans le gaz. Un couplage du modèle de dépôt d'énergie avec une modélisation du système électrique de la bougie semble nécessaire afin d'estimer cette énergie et cette durée d'une façon moins arbitraire que celle utilisée dans ces travaux ;
- les transferts thermiques aux parois : même si ils ne jouent pas sur les VCC pour les points simulés dans cette thèse, il s'avère crucial d'approfondir ce point pour étudier par SGE des combustions anormales telles que du cliquetis ou du pré-allumage. Ainsi, deux voies peuvent être explorées pour modéliser les transferts thermiques aux parois. La première consiste à améliorer les modèles de loi de paroi utilisés pour prédire le flux de chaleur. La seconde consiste à réaliser un couplage entre un code de thermique et un code SGE. Pour ce faire, une stratégie de couplage devra être mise en place et une validation devra être réalisée sur un banc moteur bien caractérisé puisque le banc moteur de SGEmac n'a pas fait l'objet de thermométrie. Ce dernier point constitue une tâche à part entière du projet ICAMDAC proposé à l'appel à projet 2010 de l'ANR. Il va également être étudié dans une thèse CIFRE PSA Peugeot Citroën qui débutera en 2010 et qui reprendra la méthodologie

SGE développée dans cette thèse pour étudier du cliquetis.

- des réactifs partiellement prémélangés rencontrés pour le mode moteur injection directe essence (IDE) de la base SGEmac. Ces points de fonctionnement requièrent une cinétique chimique adaptée à une large plage de richesse. La modélisation de la cinétique nécessitera d'être plus élaborée en s'orientant vers un schéma réduit similaire à celui proposé par Franzelli *et al.* [45] ou sur une modélisation par tabulation.
- la simulation du moteur F7P opéré en mode IDE nécessitera également de prendre en compte des écoulements diphasiques et de modéliser le spray d'essence. Dans une approche Euler-Euler, l'injection pourrait être réalisée grâce au modèle DITurBC développé par Martinez *et al.* [95].

En pratique, dans un moteur réel, l'approche 3D pure développée dans ces travaux semble assez difficile à réaliser en raison des éléments complexes situés en amont et en aval de la chambre de combustion tel qu'un turbocompresseur. Le moteur complet sera plutôt appréhendé par la méthodologie de couplage SGE/1D (Wave, GT power ou AMESim) du projet SGEmac qui va se servir de l'approche 3D pure comme référence. Cependant, la méthodologie développée dans ces travaux associée à de la chimie complexe permet d'envisager la modélisation de phénomènes fortement instationnaires dans les moteurs tel que du cliquetis.

Bibliographie

- [1] P. Adomeit, O. Lang, S. Pischinger, R. Aymanns, M. Graf, and G. Stapf. Analysis of cyclic fluctuations of charge motion and mixture formation in a DISI engine in stratified operation. *SAE Paper*, (2007-01-1412), 2007.
- [2] P. G. Aleiferis, Y. Hardalupas, A. M. K. P. Taylor, K. Ishii, and Y. Urata. Flame chemiluminescence studies of cyclic combustion variations and air-to-fuel ratio of the reacting mixture in a lean-burn stratified-charge spark-ignition engine. *Combust. Flame*, 136 :72–90, 2004.
- [3] A. Alkidas and P. Durbetaki. Ignition characteristics of a stagnation point combustible mixture. *Combust. Sci. Tech.*, 3 :187, 1971.
- [4] C. Angelberger, D. Veynante, F. Egolfopoulos, and T. Poinsot. Large eddy simulations of combustion instabilities in premixed flames. In *Proc. of the Summer Program*, pages 61–82. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 1998.
- [5] Ansys. ICEM CFD. <http://www.ansys.com/products/icemcfd.asp>.
- [6] V. Auffray. *Étude comparative de schémas numériques pour la modélisation de phénomènes diffusifs sur maillages multiéléments*. Phd thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.
- [7] D. R. Ballal and A. H. Lefebvre. The influence of flow parameters on minimum ignition energy and quenching distance. *Proc. Combust. Inst.*, 15 :1473–1481, 1974.
- [8] D. R. Ballal and A. H. Lefebvre. Ignition and flame quenching in flowing gaseous mixtures. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 357 :163–181, 1977.
- [9] H. Barths, C. Felsch, and N. Peters. Mixing models for the two-way-coupling of CFD codes and zero-dimensional multi-zone codes to model HCCI combustion. *Combust. Flame*, 156(1) :130–139, 2009.
- [10] M. Baum and T. Poinsot. Effects of mean flow on premixed flame ignition. *Combust. Sci. Tech.*, 106(1-3) :19, 1995.
- [11] J.-L. Beduneau, B. Kim, L. Zimmer, and Y. Ikeda. Measurements of minimum ignition energy in premixed laminar methane/air flow by using laser induced spark. *Combust. Flame*, 132(4) :653–665, 2003.

- [12] R. Bilger, S. Pope, K. Bray, and J. Driscoll. Paradigms in turbulent combustion research. *Proc. Combust. Inst.*, 30(1) :21–42, 2005.
- [13] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lighfoot. *Transport phenomena*. John Wiley, New York, 1960.
- [14] K. Bizon, G. Continillo, E. Mancaruso, S. Merola, and B. Vaglieco. POD-based analysis of combustion images in optically accessible engines. *Combust. Flame*, 157(4) :632–640, April 2010.
- [15] R. J. Blint. The relationship of the laminar flame width to flame speed. *Combust. Sci. Tech.*, 49 :79–92, 1986.
- [16] M. Boileau, G. Staffelbach, B. Cuenot, T. Poinsot, and C. Bérat. LES of an ignition sequence in a gas turbine engine. *Combust. Flame*, 154(1-2) :2–22, 2008.
- [17] J. Borée, S. Maurel, and R. Bazile. Disruption of a compressed vortex. *Phys. Fluids*, 14(7) :2543–2556, 2002.
- [18] G. Boudier, L. Y. M. Gicquel, T. Poinsot, D. Bissières, and C. Bérat. Effect of mesh resolution on Large Eddy Simulation of reacting flows in complex geometry combustors. *Combust. Flame*, 155(1-2) :196–214, 2008.
- [19] P. Boudier, S. Henriot, T. Poinsot, and T. Baritaud. A model for turbulent flame ignition and propagation in spark ignition engines. In T. C. Institute, editor, *Twenty-Fourth Symposium (International) on Combustion*, pages 503–510, 1992.
- [20] K. N. C. Bray and R. S. Cant. Some applications of Kolmogorov’s turbulence research in the field of combustion. *Proc. R. Soc. Lond. A. A.N. Kolmogorov Special Issue*, 434(1890) :217–240, 1991.
- [21] A. Brown, C. Stone, and P. Beckwith. Cycle-By-Cycle Variations in Spark Ignition Engine Combustion—Part I : Flame Speed and Combustion Measurements and a Simplified Turbulent Combustion Model. *SAE Paper*, (960612), 1996.
- [22] T. D. Butler and P. J. O’Rourke. A numerical method for two-dimensional unsteady reacting flows. In *16th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1503 – 1515. The Combustion Institute, 1977.
- [23] I. Celik, I. Yavuz, and A. Smirnov. Large eddy simulations of in-cylinder turbulence for internal combustion engines : a review. *Int. J. Engine Research*, 2(2) :119–148, 2001.
- [24] CentaurSoft. Centaur. <http://www.centaursoft.com>.
- [25] M. Champion, B. Deshaies, and G. G. Joulin. Relative influences of convective and diffusive transports during spherical flame initiation. *Combust. Flame*, 74 :161–170, 1988.
- [26] M. Champion, B. Deshaies, G. Joulin, and K. Kinoshita. Spherical flame initiation : Theory versus experiments for lean propane-air mixtures. *Combust. Flame*, 65(3) :319–337, 1986.
- [27] F. Charlette, D. Veynante, and C. Meneveau. A power-law wrinkling model for LES of premixed turbulent combustion : Part I - non-dynamic formulation and initial tests. *Combust. Flame*, 131 :159–180, 2002.
- [28] J. H. Chen, E. R. Hawkes, R. Sankaran, S. D. Mason, and H. G. Im. Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities : I. Fundamental analysis and diagnostics. *Combust. Flame*, 145(1-2) :128–144, 2006.
- [29] O. Colin. *Simulations aux grandes échelles de la combustion turbulente prémélangée dans les statoréacteurs*. Phd thesis, INP Toulouse, 2000.

- [30] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, and T. Poinso. A thickened flame model for large eddy simulations of turbulent premixed combustion. *Phys. Fluids*, 12(7) :1843–1863, 2000.
- [31] O. Colin and M. Rudgyard. Development of high-order Taylor-Galerkin schemes for unsteady calculations. *J. Comput. Phys.*, 162(2) :338–371, 2000.
- [32] A. W. Cook and W. H. Cabot. Hyperviscosity for shock-turbulence interactions. *J. Comput. Phys.*, 2004.
- [33] P. I. Crumpton. An efficient cell vertex method for unstructured tetrahedral grids. Technical Report 95/19, Oxford University Computing Laboratory, 1995.
- [34] T. D’Andrea, P. F. Henshaw, and D. S.-K. Ting. The addition of hydrogen to a gasoline-fuelled SI engine. *Int. J. Hydrogen. Energ.*, 29 :1541–1552, 2004.
- [35] A. Dauptain. *Allumage des moteurs fusées cryotechniques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006.
- [36] W. Deslandes. *Structure et dispersion de l’aérodynamique interne des moteurs Diesel - Caractérisation par diagnostic optique*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, France, 2004.
- [37] J. Donea. Taylor-Galerkin method for convective transport problems. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 20(1) :101–119, 1984.
- [38] J. M. Duclos and O. Colin. Arc and kernel tracking ignition model for 3D spark ignition engine calculations. In *Fifth Int. Symp. on Diagnostics, Modelling of Combustion in Internal Combustion Engines (COMODIA)*, pages 343–350, Nagoya, Japan, 2001.
- [39] F. Ducros, P. Comte, and M. Lesieur. Large-eddy simulation of transition to turbulence in a boundary layer developing spatially over a flat plate. *J. Fluid Mech.*, 326 :1–36, 1996.
- [40] G. Dugger and D. Simon. Prediction of flame velocities of hydrocarbon flames. NACA Report 1158, NACA, 1952.
- [41] V. Dugué, N. Gauchet, and D. Veynante. Applicability of large eddy simulation to the fluid mechanics in a real engine configuration by means of an industrial code. *SAE Paper*, (2006-01-1194), 2006.
- [42] A. Ern and V. Giovangigli. *Multicomponent Transport Algorithms*. Lecture Notes in Physics. Springer Verlag, Heidelberg, 1994.
- [43] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Approximating the chemical structure of partially-premixed and diffusion counter-flow flames using FPI flamelet tabulation. *Combust. Flame*, 140 :147–160, 2005.
- [44] J. Fischer, A. Velji, and U. Spicher. Investigation of cycle-to-cycle variations of in-cylinder processes in gasoline direct injection engines operating with variable tumble systems. *SAE Paper*, 2004-01-0044, 2004.
- [45] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjosé, and T. Poinso. A two-step chemical scheme for large eddy simulation of kerosene-air flames. *Submitted to Combust. Flame*, 2010.
- [46] J. Galpin, A. Naudin, L. Vervisch, C. Angelberger, O. Colin, and P. Domingo. Large-eddy simulation of a fuel-lean premixed turbulent swirl-burner. *Combust. Flame*, 155(1-2) :247–266, 2008.

- [47] S. Ghosal and P. Moin. The basic equations for the large eddy simulation of turbulent flows in complex geometry. *J. Comput. Phys.*, 118 :24 – 37, 1995.
- [48] I. Glassman. *Combustion*. Academic Press, New York, 1987.
- [49] D. Goodwin. Cantera. <http://code.google.com/p/cantera/>.
- [50] D. Goryntsev, M. Klein, A. Sadiki, and J. Janicka. Large eddy simulation of fuel-air mixing in a direct injection SI engine. In *5th Symp. on Turb. and Shear Flow Phenomena*, Munich, Germany, 2007.
- [51] D. Goryntsev, A. Sadiki, M. Klein, and J. Janicka. Large eddy simulation based analysis of the effects of cycle-to-cycle variations on air-fuel mixing in realistic DISI IC-engines. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 32, pages 2759–2766, 2009.
- [52] N. Gourdain, L. Gicquel, M. Montagnac, O. Vermorel, M. Gazaix, G. Staffelbach, M. García, J.-F. Boussuge, and T. Poinsot. High performance parallel computing of flows in complex geometries - part 1 : methods. *Comput. Science and Discovery*, 015003(2) :26pp, 2009.
- [53] C. Hasse, V. Sohm, and B. Durst. Detached eddy simulation of cyclic large scale fluctuations in a simplified engine setup. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 30 :32–43, 2009.
- [54] C. Hasse, V. Sohm, and B. Durst. Numerical investigation of cyclic variations in gasoline engines using a hybrid URANS/LES modeling approach. *Comput. Fluids*, 39(1) :25–48, 2010.
- [55] E. R. Hawkes, R. Sankaran, P. P. Pébay, and J. H. Chen. Direct numerical simulation of ignition front propagation in a constant volume with temperature inhomogeneities : II. Parametric study. *Combust. Flame*, 145(1-2) :145–159, 2006.
- [56] D. Haworth. Large-eddy simulation of in-cylinder flows. *Oil and Gas Science Tech.- Rev de l'IFP*, 54(2) :175–185, 1999.
- [57] D. Haworth and K. Jansen. Large-eddy simulation on unstructured deforming meshes : towards reciprocating IC engines. *Comput. Fluids*, 29 :493–524, 2000.
- [58] T. Herzog. World greenhouse gas emissions in 2005. Technical report, World Resources Institute, 2009.
- [59] J. B. Heywood. *Internal combustion engine fundamentals*. McGraw and Hill Series in Mechanical Engineering. McGraw-Hill, New-York, 1988.
- [60] J. O. Hirschfelder, C. F. Curtiss, and R. B. Bird. *Molecular theory of gases and liquids*. John Wiley & Sons, New York, 1969.
- [61] C. W. Hirt, A. Amsden, and J. L. Cook. An arbitrary lagrangian-eulerian computing method for all flow speeds. *J. Comput. Phys.*, 131(4) :371–385, 1974.
- [62] B. Hu and C. J. Rutland. Flamelet modeling with LES for diesel engine simulations. *SAE Paper*, (2006-01-0058), 2006.
- [63] C. J. Jachimowski. Chemical kinetic reaction mechanism for the combustion of propane. *Combust. Flame*, 55 :213–224, 1984.
- [64] F. Jaegle, O. Cabrit, S. Mendez, and T. Poinsot. Implementation methods of wall functions in cell-vertex numerical solvers. *Submitted to Flow, Turb. and Combustion*, 2010.

- [65] A. Jameson, W. Schmidt, and E. Turkel. Numerical solution of the Euler equations by finite volume methods using runge-kutta time stepping schemes. In A. p. 81-1259, editor, *14th Fluid and Plasma Dynamic Conference*, Palo Alto, 1981.
- [66] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, and H. Pitsch. Laminar burning velocities at high pressure for primary reference fuels and gasoline : Experimental and numerical investigation. *Combust. Flame*, 156(2) :292–301, February 2009.
- [67] R. Jhavar and C. J. Rutland. Using large-eddy simulations to study mixing effects in early injection diesel engine combustion. *SAE Paper*, (2006-01-0871), 2006.
- [68] B. Johansson. Cycle to cycle variations in S.I. engines - The effects of fluid flow and gas composition in the vicinity of the spark plug on early combustion. *SAE Paper*, (962084), 1996.
- [69] G. Jomaas, X. Zheng, D. Zhu, and C. Law. Experimental determination of counterflow ignition temperatures and laminar flame speeds of C2-C3 hydrocarbons at atmospheric and elevated pressures. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 30, pages 193–200, 2005.
- [70] W. P. Jones and R. P. Lindstedt. Global reaction schemes for hydrocarbon combustion. *Combust. Flame*, 73 :222–233, 1988.
- [71] B. A. Kader. Temperature and concentration profiles in fully turbulent boundary layers. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 24(9) :1541–1544, 1981.
- [72] G. Karypis and V. Kumar. A fast and high quality multilevel scheme for partitioning irregular graphs. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 20(1) :359–392, 1998.
- [73] W. Kays, M. Crawford, and B. Weigand. *Convective Heat and Mass Transfer*. McGraw-Hill, 2004.
- [74] Y. Ko and V. S. Arpaci. Spark ignition of propane-air mixtures near the minimum ignition energy : Part II. A model development. *Combust. Flame*, 83 :88–105, 1991.
- [75] A. Konnov. Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion (version 0.5). <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>, 2000.
- [76] T. Kravchik and E. Sher. Numerical modeling of spark ignition and flame initiation in a quiescent methane-air mixture. *Combust. Flame*, 99 :635–643, 1994.
- [77] D. Kuehl. Laminar-burning velocities of propane-air mixtures. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 8, page 510, 1960.
- [78] K. K. Kuo. *Principles of Combustion*. John Wiley, New York, 1986.
- [79] V. Kurdyumov, J. Blasco, A. L. Sanchez, and A. Linan. On the calculation of the minimum ignition energy. *Combust. Flame*, (136) :394–397, 2004.
- [80] K. Kuroda, Y. Nakajima, K. Sugihara, Y. Takagi, and S. Muranaka. The fast burn with heavy EGR, new approach for low NOx and improved fuel economy. *SAE Paper*, (780006), 1978.
- [81] G. Lacaze. *Simulation aux Grandes Echelles de l'allumage de moteurs fusées cryotechniques*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.
- [82] G. Lacaze, B. Cuenot, T. J. Poinso, and M. Oschwald. Large eddy simulation of laser ignition and compressible reacting flow in a rocket-like configuration. *Combust. Flame*, 156(6) :116–1180, 2009.

- [83] C. Lacour, C. Pera, B. Enaux, O. Vermorel, C. Angelberger, and T. Poinsot. Exploring cyclic variability in a spark-ignition engine using experimental techniques, system simulation and large-eddy simulation. In *Proc. of the 4th European Combustion Meeting*, 2009.
- [84] N. Lamarque. *Schémas numériques et conditions limites pour la simulation aux grandes échelles de la combustion diphasique dans les foyers d'hélicoptère*. Phd thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.
- [85] P. D. Lax and B. Wendroff. Systems of conservation laws. *Commun. Pure Appl. Math.*, 13 :217–237, 1960.
- [86] P. D. Lax and B. Wendroff. Difference schemes for hyperbolic equations with high order of accuracy. *Commun. Pure Appl. Math.*, 17 :381–398, 1964.
- [87] D. Lee, E. Pomraning, and C. J. Rutland. LES modeling of diesel engines. *SAE Paper*, (2002-01-2779), 2002.
- [88] M. J. Lee, M. Hall, O. A. Ezekoye, and R. Matthews. Voltage and energy deposition characteristics of spark ignition systems. *SAE Paper*, (2005-01-0231), 2005.
- [89] J.-P. Légier, T. Poinsot, and D. Veynante. Dynamically thickened flame LES model for premixed and non-premixed turbulent combustion. In *Proc. of the Summer Program*, pages 157–168. Center for Turbulence Research, NASA Ames/Stanford Univ., 2000.
- [90] LMS-IMAGINE. Lab AMESim. <http://www.lmsintl.com/internal-combustion-engine>.
- [91] G. Lucas and M. Brunt. The effect of combustion chamber shape on the rate of combustion in a spark ignition engine. *SAE Paper*, (820165), 1982.
- [92] J. Lumley. *Engines : An Introduction*. Cambridge University Press, 1999.
- [93] R. Maly. Ignition model for spark discharges and the early phase of flame front growth. In *18th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1747–1754. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1981.
- [94] R. Maly and M. Vogel. Initiation and propagation of flame fronts in lean CH₄-air mixtures by the three modes of the ignition spark. In *17th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 821–831. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1978.
- [95] L. Martinez, A. Benkenida, and B. Cuenot. A model for the injection boundary conditions in the context of 3D simulation of Diesel Spray : Methodology and validation. *Fuel*, 89(1) :219–228, January 2010.
- [96] E. Mastorakos. Ignition of turbulent non-premixed flames. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 35 :57–97, 2009.
- [97] F. A. Matekunas. Modes and measures of cyclic combustion variability. *SAE Paper*, 830337, 1983.
- [98] S. Matsuoaka, T. Yamaguchi, and Y. Umemura. Factors influencing the cyclic variation of combustion of spark ignition engine. *SAE Paper*, (710586), 1971.
- [99] S. Maurel, J. Borée, and J. L. Lumley. Extended proper orthogonal decomposition : Application to jet/vortex interaction. *Flow, Turb. and Combustion*, 67 :125–136, 2001.
- [100] S. Menon, P. A. McMurthy, and A. R. Kerstein. A linear eddy mixing model for large eddy simulation of turbulent combustion. In B. Galperin and S. Orzag, editors, *Large eddy simulation of complex engineering and geophysical flows*, pages 87 – 314. Cambridge University Press, 1993.

- [101] M. Metghalchi and J. C. Keck. Laminar burning velocity of propane-air mixtures at high temperature and pressure. *Combust. Flame*, 38 :143–154, 1980.
- [102] M. Metghalchi and J. C. Keck. Burning velocities of mixtures of air with methanol, isooctane, and indolene at high pressure and temperature. *Combust. Flame*, 48 :191–210, 1982.
- [103] J.-B. Michel, O. Colin, C. Angelberger, and D. Veynante. Using the tabulated diffusion flamelet model ADF-PCM to simulate a lifted methane–air jet flame. *Combust. Flame*, 156(7) :1318–1331, 2009.
- [104] A. P. Morse, J. H. Whitelaw, and M. Yianneskis. Turbulent flow measurement by laser doppler anemometry in a motored reciprocating engine. Dept. of Mechanical Engineering Report FS/78/24, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1978.
- [105] K. W. Morton, M. Stynes, and E. Süli. Analysis of a cell-vertex finite volume method for convection-diffusion problems. *Math. Comp.*, 66(220) :1389–1406, 1997.
- [106] V. Moureau, I. Barton, C. Angelberger, and T. Poinso. Towards large eddy simulation in internal-combustion engines : simulation of a compressed tumble flow. *SAE Paper*, (2004-01-1995), 2004.
- [107] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, and T. Poinso. Numerical methods for unsteady compressible multi-component reacting flows on fixed and moving grids. *J. Comput. Phys.*, 202(2) :710–736, 2005.
- [108] V. Moureau, O. Vasilyev, C. Angelberger, and T. Poinso. Commutation errors in Large Eddy Simulations on moving grids : Application to piston engine flows. In *Proc. of the Summer Program*, pages 157–168, Center for Turbulence Research, NASA AMES/Stanford University, USA, 2004.
- [109] K. Naitoh, Y. Kaneko, and K. Iwata. Cycle-resolved large eddy simulation of actual 4-valve engine based on quasi-gridless approach. *SAE Paper*, (2004-01-3006), 2004.
- [110] K. Naitoh, M. Ono, K. Kuwahara, and E. Krause. Cycle-resolved computations of compressible flow in engine. *SAE Paper*, (2002-01-2694), 2002.
- [111] F. Nicoud and F. Ducros. Subgrid-scale stress modelling based on the square of the velocity gradient. *Flow, Turb. and Combustion*, 62(3) :183–200, 1999.
- [112] W. Noh. A time dependent two space dimensional coupled eulerian lagrangian code. *Meth. Comput. Phys.*, 3, 1964.
- [113] N. Ozdor, M. Dugler, and E. Sher. Cyclic variability in spark ignition engines, a literature survey. *SAE Paper*, (940987), 1994.
- [114] A. Palm-Leis and R. A. Strehlow. On the propagation of turbulent flames. *Combust. Flame*, 13 :111–129, 1969.
- [115] D. Patterson. Cylinder pressure variations, a fundamental combustion problem. *SAE Paper*, (660129), 1966.
- [116] N. Peters. *Turbulent combustion*. Cambridge University Press, 2001.
- [117] S. Pischinger and J. B. Heywood. How heat losses to the spark plug electrodes affect flame kernel development in an SI-engine. *SAE Paper*, 892083 :2006–2014, 1990.
- [118] S. Pischinger and J. B. Heywood. A model for flame kernel development in a spark-ignition engine. In *23rd Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1033–1040. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.

- [119] H. Pitsch. Large eddy simulation of turbulent combustion. *Ann. Rev. Fluid Mech.*, 38 :453–482, 2006.
- [120] T. Poinso, D. Haworth, and G. Bruneaux. Direct simulation and modelling of flame-wall interaction for premixed turbulent combustion. *Combust. Flame*, 95(1/2) :118–133, 1993.
- [121] T. Poinso and S. Lele. Boundary conditions for direct simulations of compressible viscous flows. *J. Comput. Phys.*, 101(1) :104–129, 1992.
- [122] T. Poinso and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, 2nd edition, 2005.
- [123] M. Porta. *Développement, vérification et validation des outils LES pour l'étude du bruit de combustion et de l'interaction combustion/acoustique/turbulence - TH/CFD/07/46*. Phd thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2007.
- [124] B. Renou and A. Boukhalfa. An experimental study of freely propagating premixed flames at various lewis numbers. *Combust. Sci. Tech.*, 162(1) :347–370, January 2001.
- [125] S. Richard. *Simulation aux grandes échelles de la combustion dans les moteurs à allumage commandé*. Phd thesis, Ecole Centrale Paris, 2005.
- [126] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, A. Benkenida, C. Angelberger, and D. Veynante. Towards large eddy simulation of combustion in spark ignition engines. *Proc. Combust. Inst.*, 31(3059-3066), 2007.
- [127] S. Richard, O. Vermorel, and D. Veynante. Development of LES models based on the flame surface density approach for ignition and combustion in SI engines. In *ECCOMAS Thematic Conference on computational combustion*, pages 1–20, 2005.
- [128] A. Roux. *Simulation aux Grandes Echelles d'un statoréacteur*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2009.
- [129] A. Roux, L. Gicquel, S. Reichstadt, N. Bertier, G. Staffelbach, F. Vuillot, and T. Poinso. Analysis of unsteady reacting flows and impact of chemistry description in Large Eddy Simulations of side-dump ramjet combustors. *submitted to Combust. Flame*, 2009.
- [130] A. Roux, L. Gicquel, Y. Sommerer, and T. Poinso. Large eddy simulation of mean and oscillating flow in a side-dump ramjet combustor. *Combust. Flame*, 152(1-2) :154–176, 2008.
- [131] M. Rudgyard. Cell vertex methods for steady inviscid flow. In V. K. I. for Fluid Dynamics, editor, *Lectures Series 1993-04*, volume 1993-04. Von Karman Institute for Fluid Dynamics, 1993.
- [132] F. M. Rupley, R. J. Kee, and J. A. Miller. *CHEMKIN-2 : A FORTRAN Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-phase Chemical Kinetics*, 1989.
- [133] P. Sagaut. *Introduction à la simulation des grandes échelles*. Springer, mathématiques & applications edition, 1998.
- [134] P. Sagaut. *Large Eddy Simulation for Incompressible Flows*. Springer, Berlin, 1998.
- [135] P. Schmitt, T. Poinso, B. Schuermans, and K. P. Geigle. Large-eddy simulation and experimental study of heat transfer, nitric oxide emissions and combustion instability in a swirled turbulent high-pressure burner. *J. Fluid Mech.*, 570 :17–46, 2007.
- [136] T. G. Scholte and P. B. Vaags. The burning velocity of hydrogen-air mixtures and mixtures of some hydrocarbons with air. *Combust. Flame*, 3 :495–501, 1959.

- [137] L. Selle, F. Nicoud, and T. Poinso. The actual impedance of non-reflecting boundary conditions : implications for the computation of resonators. *AIAA Journal*, 42(5) :958–964, 2004.
- [138] L. Sirovich. Turbulence and the dynamics of coherent structures. *Quart. Appl. Math.*, XLV(3) :561–571, 1987.
- [139] T. M. Sloane. Energy requirements for spherical ignitions in methane-air mixtures at different equivalence ratios. *Combust. Sci. Tech.*, 73 :351–365, 1990.
- [140] T. M. Sloane. Ignition and flame propagation modeling with an improved propane oxidation mechanism. *Combust. Sci. Tech.*, 83 :77–96, 1992.
- [141] T. M. Sloane. Numerical simulation of electric spark ignition in methane-air mixtures at pressures above one atmosphere. *Combust. Sci. Tech.*, 86 :121–133, 1992.
- [142] T. M. Sloane and P. D. Ronney. A comparison of ignition phenomena with detailed and simplified kinetics. *Combust. Sci. Tech.*, 88 :1–13, 1992.
- [143] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations : I. The basic experiment. *Mon. Weather Rev.*, 91 :99–164, 1963.
- [144] G. Smith, D. Golden, M. Frenklach, N. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. Bowman, R. Hanson, S. Song, W. G. Jr., V. Lissianski, and Z. Qin. Gri-mech 3.0 web site. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 1999.
- [145] J. Soltau. Cylinder pressure variations in petroleum engines. In *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers*, volume 2, 1961.
- [146] T. Soulères. *Simulations des grandes échelles d'écoulements dans des géométries fixes et mobiles : Application aux moteurs à pistons*. PhD thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2003.
- [147] P. R. Spalart. Strategies for turbulence modelling and simulations. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 21(3) :252–263, 2000.
- [148] D. B. Spalding. Development of the Eddy-Break-Up model of turbulent combustion. In *16th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 1657–1663. The Combustion Institute, 1976.
- [149] G. Staffelbach, L. Gicquel, G. Boudier, and T. Poinso. Large Eddy Simulation of self-excited azimuthal modes in annular combustors. *Proc. Combust. Inst.*, 32 :2909–2916, 2009.
- [150] C. Stone. *Introduction to Internal Combustion Engines*, volume 2nd. Edn. Macmillan, 1992.
- [151] D. R. Stull and H. Prophet. Janaf thermochemical tables, 2nd edition. Technical Report NSRDS-NBS 37, US National Bureau of Standards, 1971.
- [152] V. Subramanian, P. Domingo, and L. Vervisch. Large eddy simulation of forced ignition of an annular bluff-body burner. *Combust. Flame*, 2009.
- [153] T&E. Reducing CO₂ emissions from new cars : A study of major car manufacturers' progress in 2007. Technical report, European Federation for Transport and Environment, 2007.
- [154] R. Teets and J. Sell. Calorimetry of ignition sparks. *SAE transactions 97*, pages 253–280, 1989.
- [155] L. Thobois. *Intérêt et faisabilité de la simulation aux grandes échelles dans les moteurs automobiles*. Phd thesis, Institut National Polytechnique de Toulouse, 2006.
- [156] L. Thobois, R. Lauvergne, and T. Poinso. Using LES to investigate reacting flow physics in engine design process. *SAE Paper*, (2007-01-0166), 2007.

- [157] M. S. Toledo, L. L. Penven, M. Buffat, A. Cadiou, and J. Padilla. Large eddy simulation of the generation and breakdown of a tumbling flow. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 28 :113–126, 2007.
- [158] A. Triantafyllidis, E. Mastorakos, and R. L. G. M. Eggels. Large eddy simulations of forced ignition of a non-premixed bluff-body methane flame with conditional moment closure. *Combust. Flame*, 2009.
- [159] C. M. Vagelopoulos and F. Egolfopoulos. Direct experimental determination of laminar flame speeds. In *27th Symp. (Int.) on Combustion*, pages 513–519. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998.
- [160] O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, A. Benkenida, and D. Veynante. Towards the understanding of cyclic variability in a spark ignited engine using multi-cycle LES. *Combust. Flame*, 156 :1525–1541, 2009.
- [161] R. Verzicco, J. Mohd-Yusof, P. Orlandi, and D. Haworth. LES in complex geometries using boundary body forces. In *Proceedings of the Summer Program*, pages 171–186, Center for Turbulence Research, NASA AMES, Stanford University, USA, 1998.
- [162] R. Verzicco, J. Mohd-Yusof, P. Orlandi, and D. Haworth. Large eddy simulation in complex geometric configurations using boundary body forces. *AIAA Journal*, 38(3) :427–433, March 2000.
- [163] D. Veynante and L. Vervisch. Turbulent combustion modeling. *Prog. Energy Comb. Sci.*, 28 :193 – 266, 2002.
- [164] J. von Neumann and R. D. Richtmeyer. A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *J. Appl. Phys.*, 21 :231, 1950.
- [165] C. Westbrook and F. Dryer. Simplified reaction mechanism for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. *Combust. Sci. Tech.*, 27 :31–43, 1981.
- [166] F. A. Williams. *Combustion Theory*. Benjamin Cummings, Menlo Park, CA, 1985.
- [167] M. B. Young. Cyclic dispersion – Some qualitative cause-and-effect relationships. *SAE Paper*, (800459), 1980.
- [168] M. B. Young. Cyclic dispersion in the Homogeneous-Charge Spark-Ignition engine, A literature survey. *SAE Paper*, (810020), 1981.
- [169] Z. Zhao, A. Kazakov, J. Li, and F. Dreyer. The initial temperature and N₂ dilution effect on the laminar flame speed of propane/air. *Combust. Sci. Tech.*, 176(10) :1705–1723, 2004.

Annexes

La décomposition en modes propres : POD

La POD consiste à remanier les quantités de l'écoulement en une série de fonctions orthogonales ou modes. Ces modes sont obtenus par la minimisation de l'erreur associée à une opération de projection. Cette description de l'écoulement fournit une distribution énergétique des structures cohérentes caractérisées par une distribution spatiale et temporelle de chaque mode.

Le principe de la POD est de déterminer une base de vecteurs $(\varphi_k, k = 1, \dots, N)$ qui maximise la fonction définie en Eq. A.1.

$$\max \frac{\langle |\{\mathbf{q}, \varphi\}|^2 \rangle}{\|\varphi\|^2} = \frac{\langle |\{\mathbf{q}, \Phi\}|^2 \rangle}{\|\Phi\|^2} \quad (\text{A.1})$$

où $\{\mathbf{q}, \varphi\}$ est le produit scalaire associé à la projection et $\langle \cdot \rangle$ correspond à une moyenne en temps. Les vecteurs de la base POD sont des fonctions propres du noyau $\mathcal{K}(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \{\mathbf{q}(\mathbf{x}, t), \mathbf{q}(\mathbf{x}', t)\}$, où \mathbf{x} et \mathbf{x}' dénotent les coordonnées spatiales et t le temps.

Dans le contexte de simulations numériques telle que de la SGE, l'échantillon statistique est réduit et la POD "snapshot" introduite par Sirovich [138] est préférée. Cette méthode permet de définir les fonctions propres Φ sans un calcul explicite du noyau \mathcal{K} . Le concept de cette méthode est d'acquérir une collection d'observations $\mathbf{q}(\mathbf{x}, t_k)$ régulièrement espacées en temps sur un domaine spatial noté Ω . Dans un moteur à allumage commandé, à cause de la déformation de Ω , la POD est effectuée par phase, et les modes décrivent ainsi la quantité \mathbf{q} à un angle donné du cycle moteur. Les fonctions propres sont alors déterminées par une combinaison linéaire des N observations collectées à l'angle spécifié :

$$\Phi^{(i)}(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^N a_k^{(i)} \times \mathbf{q}(\mathbf{x}, t_k) \quad (\text{A.2})$$

Le coefficient $a_k^{(i)}$ est la $k^{\text{ième}}$ composante de $\mathbf{a}^{(i)}$, vecteur propre de la matrice de corrélation C . $\Phi^{(i)}(\mathbf{x})$ est la fonction propre associée au mode i . Sur un temps de simulation τ , le problème aux valeurs

propres est le suivant :

$$\int_{\tau} C(t, t') a^{(n)}(t') dt' = \lambda^{(n)} a^{(n)}(t) \Leftrightarrow C_{ij} = \{\mathbf{q}(\mathbf{x}, t_i), \mathbf{q}(\mathbf{x}, t_j)\} \quad (\text{A.3})$$

La valeur propre $\lambda^{(i)}$ associée au vecteur propre $\mathbf{a}^{(i)}$ détermine l'importance du $i^{\text{ème}}$ mode POD.

Après projection sur la base POD, la quantité de l'écoulement étudiée peut être approchée par une combinaison linéaire des M premiers modes :

$$\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, t_k) = \sum_{i=1}^M a_k^{(i)}(t) \Phi^{(i)}(\mathbf{x}) \quad (\text{A.4})$$

En pratique, si à un angle donné on a un ensemble de N solutions SGE $Q^{(i)}_{i \in [1; N]}$ avec chaque solution définie sur un maillage de N_{noeuds} noeuds, la POD sur la variable w est mise en oeuvre de la façon suivante :

- La matrice d'autocorrélation \mathbf{C} est construite à partir des N solutions :

$$C_{ij} = \{Q^{(i)}, Q^{(j)}\} = \sum_{r=1}^{N_{\text{noeuds}}} \{w_r^i, w_r^j\} \quad (i, j) \in [1; N]^2 \quad (\text{A.5})$$

- Cette matrice possède N valeurs propres positives puisqu'elle est définie positive : $\mathbf{C} \mathbf{a}^{(i)} = \lambda^{(i)} \mathbf{a}^{(i)}$.
- Les vecteurs propres de \mathbf{C} sont triés par ordre de valeurs propres décroissantes et constituent la base des modes propres temporels. Les fonctions propres spatiales sont obtenues à partir des M premiers modes temporels et des solutions :

$$\Phi_k = \sum_{i=1}^N \{a_i^{(k)}, Q^{(i)}\} \quad \text{avec } k \in [1; M] \quad (\text{A.6})$$

- La base ainsi construite est orthogonale mais non normée. Dans cette base, on peut montrer que chaque solution s'écrit :

$$Q^{(i)} = \sum_{k=1}^M a_k^{(i)} \Phi_k \quad \text{avec } i \in [1; N], \quad (\text{A.7})$$

Annexe **B**

Article soumis au Symposium de Combustion

LES study of cycle-to-cycle variations in a spark ignition engine

B. Enaux^{1,2}, V. Granet^{1,3}, O. Vermorel¹, C. Lacour⁴, C. Pera⁴, C. Angelberger⁴, T. Poinso⁵

1 : CERFACS, CFD Team, 42 Avenue G. Coriolis, 31057 Toulouse Cedex 01, France

2 : PSA Peugeot Citroën - DRIA, 2 Route de Gisy, 78943 Velizy-Villacoublay Cedex, France

3 : Renault SAS, 1 Avenue du Golf, 78288 Guyancourt Cedex, France

4 : IFP, 1 & 4 Avenue de Bois-Préau, 92852 Rueil-Malmaison Cedex, France

5 : Institut de Mécanique des Fluides de Toulouse, CNRS, Avenue C. Soula, 31400 Toulouse, France

Colloquium topic : IC engine and gas turbine combustion.

Abstract

Multi-cycle Large-Eddy Simulation (LES) of flow and combustion in a single cylinder engine set-up are presented in order to validate the ability of this technique to reproduce cyclic combustion variability in a spark ignition engine. The simulated engine operating point is part of a larger experimental database acquired at IFP and specifically designed to validate LES techniques in terms of cycle-to-cycle prediction. To characterize individual cycles, the database combines acquisitions of pressure and temperature in different locations of the engine set-up with optical diagnostics in the intake pipe and the cylinder. This new experimental database combined with LES is a powerful tool to study cycle-to-cycle variations (CCV). The operating points include points with low and high CCV levels. The LES includes the whole engine set-up, and covers 25 consecutive four-stroke engine cycles for a reference operating point with low CCV. The results show that LES is able to reproduce the experimental findings, and illustrate how LES can help explain the sources of CCV. In the present case it is shown that CCV are essentially due to velocity fluctuations at the spark plug, which induce variations of the early flame kernel growth and of the overall combustion duration.

Keywords

Large-Eddy Simulation, cyclic combustion variations, spark ignition, multi-cycle engine simulation, premixed combustion.

1 Introduction

Instabilities are the heart of many present research efforts in gas turbines [1, 2, 3, 4] or piston engines [5, 6]. Cycle-to-cycle variations (CCV) in piston engines are detrimental in terms of combustion efficiency. Understanding and controlling CCV is thus an essential step to further optimize overall engine efficiency. The difficulty is that many different mechanisms can lead to CCV, and that their importance and interactions can hardly be studied using only standard engine experiments based on cylinder pressure analysis.

The recent development of Large-Eddy Simulation (LES) tools has opened new perspectives in this field : computations of multiple cycles in piston engines [5, 6, 7, 8] have demonstrated the potential of LES in terms of studying CCV. A major shortcoming of these studies was the lack of dedicated experimental data for validating the performed LES studies in terms of their ability to accurately describe the physical phenomena participating to CCV. Another difficulty was the simulation of a sufficiently high number of engine cycles to be able to access statistical information that could be compared with experiments.

In the present work, parallel LES was used to simulate 25 consecutive cycles of the reacting flow in a single cylinder engine set-up for which dedicated experimental data were acquired. In order to limit the uncertainties resulting from boundary conditions, the LES spans the whole engine set-up : intake plenum and pipes, cylinder, exhaust pipes and plenum. In the experiments, the engine was fuelled with a controlled mixture of gaseous propane and air, mass flow rates being controlled using sonic nozzles. This setup provides simple and accurate boundary conditions for the simulation : the mean flow rates are carefully monitored by the sonic nozzles while the plenums impose almost constant pressure conditions for the LES boundary conditions. The engine was instrumented with multiple pressure and temperature transducers to monitor in a cycle-resolved manner the flow all along the engine set-up. Optical diagnostics in the intake duct and the cylinder allowed to characterize the flow and combustion in the cylinder. Acquired engine operating points include both stable points (*i.e.*, with low levels of CCV) and unstable points (*i.e.*, with high levels of CCV). The objective of the experiment is to build a database to validate LES and its ability to accurately reproduce CCV. The presented work is a first contribution in this direction, aiming at validating the predictive capability of LES on a reference stable operating point.

Section 2 presents the configuration while Section 3 describes the LES solver and models. Results (acoustic wave identification, pressure variability, cyclic variation mechanisms) are presented in Section 4.

2 Configuration

The engine set-up is shown in Fig. 1. The single cylinder spark ignition engine has a four-valve, pent-roof combustion chamber with a flat piston. Various operating points have been acquired, comprising motored and fired operation with low CCV (stable) and high CCV (unstable) levels [9]. The operating point simulated in the present work is a stable fired case fuelled with a gaseous propane/air mixture (Table 1). Air is introduced in a first plenum (not represented in Fig. 1), and mixed with gaseous propane in a second plenum sufficiently large to obtain an homogeneous mixture. Both air and propane flow rates are controlled by sonic nozzles. At the engine exhaust, gases are tranquilized in the exhaust plenum. Close to the mixing and exhaust plenums, a flame-arrestor is added for safety reasons.

One hundred experimental consecutive cycles have been acquired for this operating point. Several

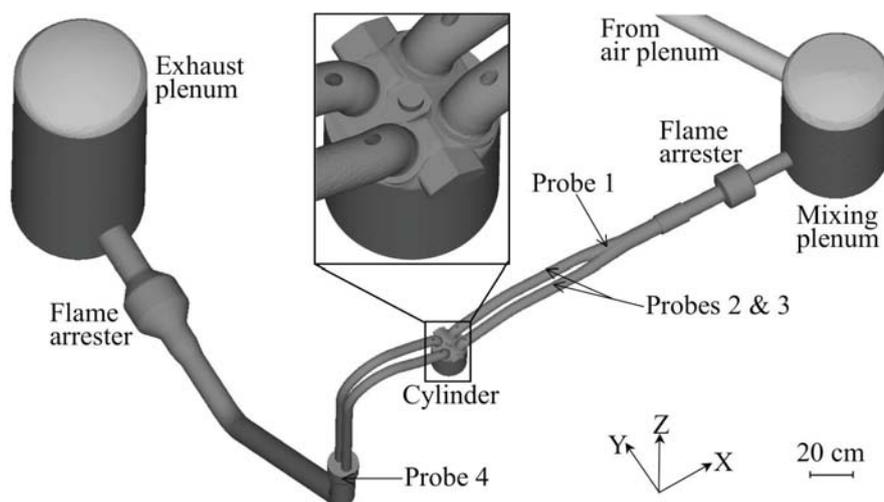


FIG. 1 - Experimental set-up and computational domain. Pressure transducer locations are shown by the arrows.

diagnostics (particle image velocimetry (PIV), OH laser induced fluorescence (LIF), chemiluminescence) were used to characterize flow and combustion in the cylinder. Instantaneous pressure and temperature signals were recorded in a cycle resolved way along the intake (probes 1, 2 and 3) and exhaust ducts (probe 4).

3 Numerical approach and methodology

3.1 LES solver and grids

Computations are performed with the AVBP code [10]. AVBP is a fully compressible and explicit code that solves the multi-species Navier-Stokes equations with realistic thermochemistry on unstructured grids. Convection terms are discretized using a finite volume Lax-Wendroff scheme [11]. Sub-grid stresses are modeled by a classical Smagorinsky model [12]. The moving grid management is handled by an Arbitrary Lagrangian Eulerian method combined with a Conditioned Temporal Interpolation technique [13].

The present computation covers 18 720 Crank Angle Degrees (CAD) i.e. 26 consecutive cycles including intake, compression, expansion and exhaust strokes. For each cycle, 41 grids are used to handle moving boundaries. A second-order scheme [13] is used to interpolate the solution for each grid topology change. The smallest grids (~ 2.2 million tetrahedral cells) are found around TDC, the largest (up to 9.6 million cells) are used to describe the intake and exhaust valve closures. This method allows to limit the grid deformation while maintaining a spatial resolution Δx close to 0.8 mm in the cylinder during the whole cycle. Numerical and precision issues are discussed in [5] and [14].

The computational domain extends from the mixing plenum, where a perfect propane/air mixture is assumed, to the exhaust plenum where burnt gases are ejected. Pressure is imposed [10, 15] at the top of the mixing and exhaust plenums (Fig. 1). The target pressures are time-varying signals extracted from

	Unit	Value
Compression ratio	[-]	9.9
Rotational speed	[rpm]	1200
Bore	[mm]	82
Stroke	[mm]	83.5
Connecting rod length	[mm]	144
Intake Valve Opening (IVO)	[CAD]	350
Intake Valve Closure (IVC)	[CAD]	-120
Exhaust Valve Opening (EVO)	[CAD]	120
Exhaust Valve Closure (EVC)	[CAD]	-350
Spark timing	[CAD]	-20

TAB. 1 - Characteristics of the engine. Crank Angle Degrees (CAD) are relative to combustion Top-Dead-Center (TDC).

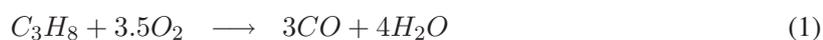
experimental data. They typically stay very close to the mean of 0.4 bar at the mixing plenum and 1 bar at the exhaust plenum. Compared to previous simulations, where the domain only covered a part of the intake/exhaust ducts [5, 6, 8], this computational domain greatly simplifies the definition of the boundary conditions. Back-flow phenomena occurring in the intake and exhaust lines are naturally damped within the plenums and do not have to be accounted for at the boundaries of the present domain. Walls are handled using a logarithmic law-of-the-wall formulation for velocity and temperature [3]. Note that this methodology has already been applied and validated on a motored engine operating point [16]. The CPU time is approximately 1.4 day per cycle on 400 processors of a SGI Altix ICE 8200 cluster.

3.2 Flame-arrestor

Accounting in the LES for the flame-arrestors installed in the experiment was found to be mandatory, as they strongly affect the acoustic behavior of the whole system. These devices contain several hundreds of small channels of 0.5 mm diameter (porosity $\sigma = 0.68$), which are too small for LES. Their effect was thus modeled using the approach of Mendez and Eldredge [17], which prescribes a discharge law to evaluate the pressure drop and the acoustic transfer matrix through a porous device as a function of the bulk velocity and a discharge coefficient C_D . Preliminary tests have shown that the model allows to recover the correct impedance of the flame-arrestors as well as the pressure losses over a wide range of velocity.

3.3 Combustion modeling

Combustion is modeled using Arrhenius type reaction rates. A reduced two-step chemical scheme (called C3H8-BE2 in the rest of the manuscript) accounting for five species is used to describe propane/air chemistry :



Reaction (1) controls the flame speed while the $CO-CO_2$ equilibrium allows to accurately reproduce the flame temperature. The forward reaction rates for these two reactions read :

$$k_{f,1} = A_1 e^{\left(\frac{-E_{a,1}}{RT}\right)} [C_3H_8]^{n_{C_3H_8}} [O_2]^{n_{O_2,1}} \quad (3)$$

$$k_{f,2} = A_2 e^{\left(\frac{-E_{a,2}}{RT}\right)} [CO]^{n_{CO}} [O_2]^{n_{O_2,2}} \quad (4)$$

A_j and $E_{a,j}$ are the pre-exponential factor and the activation energy of reaction j ($j = 1, 2$) and n_k is the reaction exponent for species k (Table 2).

	C_3H_8 oxidation		$CO-CO_2$ equ.	
E_a [cal/mol]	3.4×10^4		1.2×10^4	
A [$cm^3/mol.s$]	5.8232×10^{12}		2.0×10^9	
Reaction exponents [-]	$n_{C_3H_8}$	0.8	n_{CO}	1.00
	$n_{O_2,1}$	0.86	$n_{O_2,2}$	0.50

TAB. 2 - Arrhenius parameters for the C3H8 – BE2 scheme.

This reduced scheme is built to recover the laminar flame speed and the adiabatic temperature at stoichiometry and for pressure and temperature ranges representative of the operating point. Figure 2 compares the laminar flame speed S_L^0 and the adiabatic temperature T_{adia} predicted by the C3H8-BE2 scheme with the power law of Metghalchi and Keck [18], the detailed mechanisms of Jerzembeck *et al.* [19] and the Gri-Mech 3.0 [20].

The ranges of pressure and temperature used in abscissa mimic an isentropic evolution of fresh gases from a reference state representative of ignition conditions $P_{ign} = 5.44 \text{ bar}$, $T_{ign} = 723 \text{ K}$. It is worth mentioning that neither [18] nor [19] show results for such high pressures and temperatures. In [18], the maximum fresh gases temperature is 750 K . S_L^0 values presented in Fig. 2 are therefore extrapolated values from a simple power law and coefficients given in this paper (see Eq. (14) and Tab. 2 in [18]). In [19], results are given for a pressure up to 5 atm . Therefore, values shown in Fig. 2 are the results of new CANTERA [21] calculations using the full chemical kinetic mechanism validated in [19]. Figure 2 shows that C3H8-BE2 correctly reproduces the pressure and temperature dependence of the laminar flame speed and the adiabatic temperature from 5 to 20 bars.

Flame/turbulence interactions are taken into account by the dynamically thickened flame model [22]. Ignition is described via the energy deposition model [23, 24]. During the ignition phase, thickening is not activated and begins only when the flame starts propagating. The spark is replaced by a volumetric source term added to the energy equation. The source term distribution is Gaussian in time and space. The deposit lasts about $100 \mu s$ and the deposit diameter is 2.5 mm long. The total energy transmitted to the gas is 20 mJ , which corresponds to 10% of the overall energy provided by the electrical spark. This percentage is a classical estimate considering losses due to thermal conduction to the electrodes, radiation and shock wave expansion [25, 26]. In order to solve the early kernel propagation, the mesh is specifically refined around the deposition spot ($\Delta x = 0.2 \text{ mm}$).

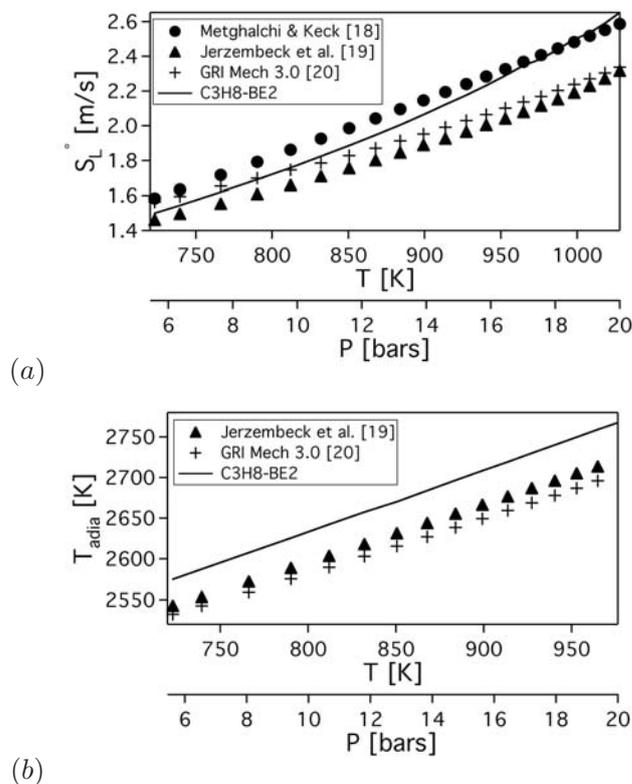


FIG. 2 - Laminar flame speed (a) and adiabatic temperature (b) obtained with C3H8-BE2 for an isentropic compression.

4 Results and discussion

Starting from a preliminary motored engine computation, the computation covers 26 consecutive cycles. The criteria used to assess the convergence of the simulation are both the trapped mass in the cylinder and the internal burnt gases recirculation rate. Figure 3 shows the total trapped mass in the cylinder and the internal gas residuals (IGR) for the 26 cycles.

The total mass stabilizes from cycle 2 very close to the experimental value of 181 mg estimated with a system simulation approach [9]. The IGR are shown to account for about 12.5% of the total mass, close to the experimental value of 9.6%. Note that the variations in IGR are much higher ($\sim 10\%$) than the variations in trapped mass ($< 1\%$). The first cycle mass is obviously much larger than the other cycles because it is not initialized correctly (unlike the 25 others). Therefore, only the last 25 cycles are considered hereafter and cycle 1 will actually refer to the second simulated cycle.

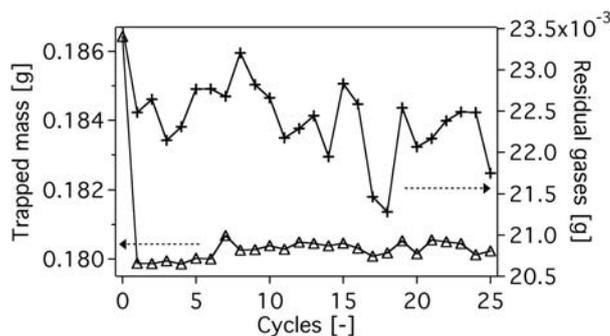


FIG. 3 - Total trapped mass (Δ) and residual gases mass (+) in the cylinder for the 26 LES cycles.

4.1 Acoustic behavior

One of the main advantages of this configuration is to completely account for acoustics. The phase-averaged pressure signals at probes 1, 2 and 3 show that the LES correctly reproduces the experimental acoustic behavior in the intake ducts during the whole cycle. Figure 4a shows the pressure evolution at probe 3 and confirms that the acoustics in the intake pipes are correctly captured by the LES (probes 1 and 2 show very similar results but are not shown for the sake of concision). The damping of the signal from IVC to IVO, i.e. when the intake valves are closed, is well reproduced by the computation.

However, LES also exhibits a high frequency component at 420 Hz not present in the experiments. Additional computations using the Helmholtz solver AVSP [27] revealed that this frequency is neither a hydrodynamic mode nor a numerical artifact, but a real acoustic mode, the five-quarter wave mode of the complete intake line. At this point, no information allows to assert with certainty why this acoustic mode is damped in the experiments and not in the LES. It is however expected that these differences will not affect the conclusions. Comparisons at probe 4 located in the exhaust duct (Fig. 4b) allow to draw the same conclusions. Note that the modeling of the flame-arrestors is of primary importance to correctly predict the pressure evolution both in the intake and exhaust lines [16]. Preliminary computations without flame-arrestors showed a noticeable shift in phase and insufficient damping.

4.2 Indicators of in-cylinder variability : pressure and burnt mass fraction (BMF)

Figure 5 displays the temporal evolution of the in-cylinder pressure, in terms of phase-averaged value P_{mean} and envelope. The pressure envelope delineates the zone where 95 % of the cycles are included and is defined as $P_{mean}(t) \pm 2\sigma_P$ with σ_P the pressure standard deviation.

The agreement between LES and experiments is satisfactory. Although the number of simulated cycles is too small to be fully representative, the amplitude of the statistical envelopes is quite similar, indicating that the cyclic variability of the experiment is captured by the LES. However, a slight temporal shift is visible during the expansion stroke, both for the envelope and the mean value. This shift is also noticeable in Fig. 6 which shows the temporal evolution of the BMF, in terms of phase-average

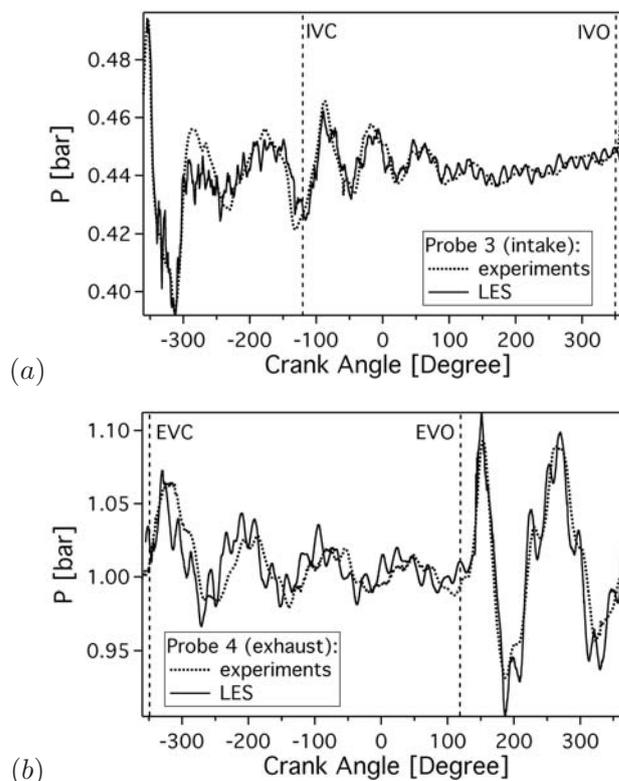


FIG. 4 - Phase-averaged crank-resolved pressure at probes 3 (a) and 4 (b) (see Fig. 1 for probe positions).

value and envelope. Both experimental and LES curves are here extracted from a classical 0D combustion analysis tool. The amplitude of the statistical envelopes is once again comparable. The consumption rates are very similar in the experiment and in the LES during the first 15 CAD and slightly drift apart afterwards. This shift in the combustion process partly explains the delay observed on the pressure curves. Another reason could come from an erroneous estimation of the wall temperatures, which are difficult to characterize accurately in the experiments.

Another way to highlight CCV is to plot the maximum pressure of cycle $n + 1$ versus the maximum pressure of cycle n . Indeed, in-cylinder peak pressure is a classical indicator of cycle-to-cycle variations [28].

Figure 7 confirms that the range of combustion variation is similar in the experiments and in the LES. The mean pressure peak and its standard deviation are in close agreement : 19.87 bar and 0.91 bar for the LES versus 19.73 bar and 0.93 bar for the experiments. The relative variation in peak pressure is small in both cases (4.6% and 4.7% respectively) confirming that this operating point may be considered as stable. No apparent correlation exists between a cycle and the following one. The sequence of cycles seems completely random, without convergence towards a single cycle.

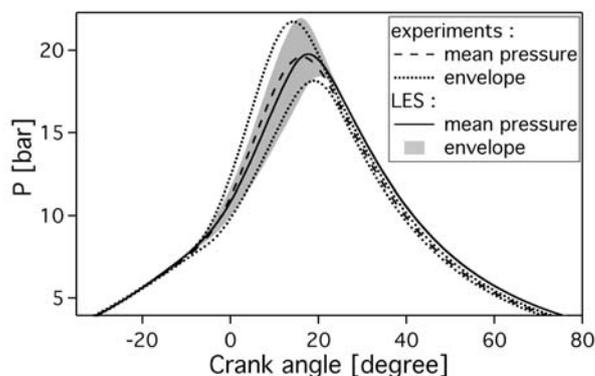


FIG. 5 - Comparison of experimental and LES cylinder pressure.

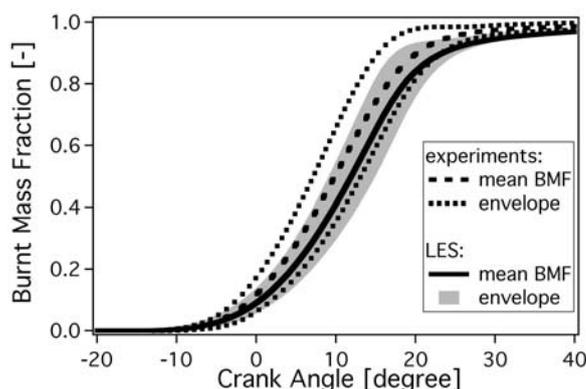


FIG. 6 - Comparison of experimental and LES BMF.

4.3 Analysis of cycle-to-cycle combustion variations

The observed pressure variability is a direct consequence of variations in the flame development. The evolution of the resolved LES flame surface (measured by the area of the progress variable $c = 0.5$ iso-surface) shown in Fig. 8 confirms the cyclic variability of the combustion process.

The grey area represents the statistic envelope of the 25 individual cycles. For the sake of clarity, only three typical individual cycles are explicitly shown (cycles 14, 15 and 16). Although these three cycles are consecutive, they exhibit noticeably different behaviors in terms of peak pressures, reaching respectively 20.98 bar, 21.08 bar and 18.01 bar. The combustion process shows different stages which can be highlighted using the classical indicators CA2, CA10, CA50 and CA90, where CA X is the period during which the burnt mass fraction reaches $X\%$. The first phase delineated by the CA2 is the initial flame development stage. The second phase may be considered as a phase of free turbulent propagation : the flame front is located under the cylinder head, mainly on the exhaust side, and the interactions with

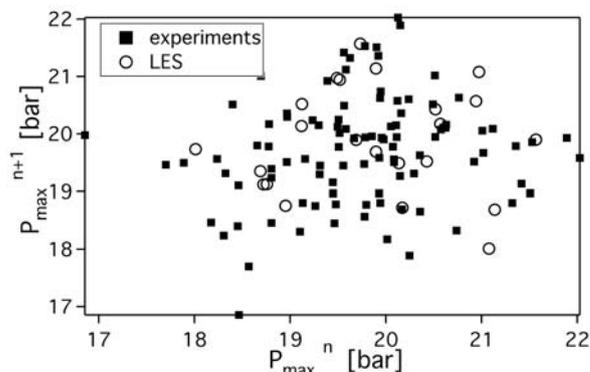
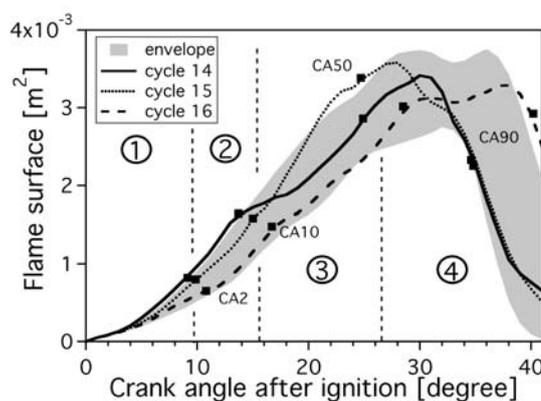
FIG. 7 - Maximum cylinder pressure of cycle $n + 1$ versus maximum cylinder pressure of cycle n .

FIG. 8 - Evolution of resolved flame surface.

the walls are limited. On the contrary, the third and fourth phases are characterized by strong interactions with walls, first the piston (phase 3) and then the cylinder liner (phase 4).

The first phase is known to be the most crucial stage with respect to cycle-to-cycle variations [28, 29]. This assertion is partly confirmed by the coefficient of variation of the CA2, COV_{CA2} , which is rather high at 5.14%. Moreover, Fig. 9 shows a good correlation between CA2 and CA90 (Pearson correlation coefficient $R_{CA2-CA90} = 0.75$ assuming a linear dependence): a fast (respectively slow) initial flame growth leads most often to a globally fast (respectively slow) combustion cycle. Figure 8 suggests that phase 2 is similar from cycle to cycle, which is confirmed by the high correlation coefficient between CA2 and CA10 $R_{CA2-CA10} = 0.92$. Singular events occur during phase 3 which can largely change the initial trend. This is the case for cycle 14 compared to cycle 15 for example. This variability is clearly underlined by the drop in the correlation coefficient $R_{CA10-CA50} = 0.76$. Finally, phase 4 seems to follow on naturally the third phase and does not introduce additional variability in the combustion process ($R_{CA50-CA90} = 0.94$).

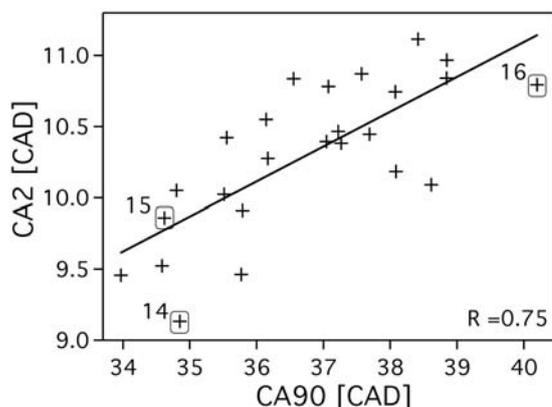


FIG. 9 - Correlation between CA2 and CA90.

4.4 Factors of cyclic combustion variations

In order to determine the origins of the combustion variations, the emphasis is put on the first phase which was shown to be a key stage. During this phase, the initially laminar spherical flame kernel becomes progressively wrinkled and turbulent. Many factors influence the duration of this phase : mixture composition (local equivalence ratio, dilution), thermodynamic conditions, turbulence or mean flow velocity in the spark plug vicinity among the most important ones. For the present computation, the local equivalence ratio is not a relevant parameter since the mixture is perfectly premixed. All other parameters vary notably from cycle to cycle and it is difficult to separate their respective influence. Some attempts to correlate the local dilution ratio or the temperature at spark timing with the combustion speed have revealed no clear tendency. On the contrary, the influence of the velocity field is much more evident. Figure 10 (left) shows velocity vectors in a cut plane through the spark plug at spark timing while Fig. 10 (right) shows the flame front 5 CAD later for the three cycles 14, 15 and 16. The comparison clearly highlights the importance of the residual tumble motion at spark timing since it determines in a large part how the initial kernel will develop with respect to the spark plug cavity. For cycles 14 and 15, the flow resulting from the tumble pushes the kernel towards the exhaust side. For cycle 16, the tumble motion is already on the exhaust side and the kernel is driven in the spark plug cavity. The consequences of this initial location of the flame kernel are multiple. Heat losses are more important (global heat losses integrated over the cylinder head walls during the first 10 CAD after ignition are 6% higher in cycle 16 compared to cycle 14) and partial quenching is more likely to occur if the kernel is completely confined. Moreover, the turbulence in the spark plug cavity is much less intense than in the rest of the combustion chamber. As an illustration, the evolution of the velocity fluctuations, u' , integrated over the flame surface is displayed in Fig. 11. The definition of u' has been carefully chosen [22] in order not to account for the dilatational part of the velocity. Figure 11 shows that a cycle which experiences a slow combustion process (cycle 16) encounters level of u' much less intense in the first 10 CAD after ignition than fast cycles like cycles 14 and 15. Obviously, these mechanisms make the combustion speed lower if the kernel develops in the cavity and the resulting peak cylinder pressure will be also lower in this case.

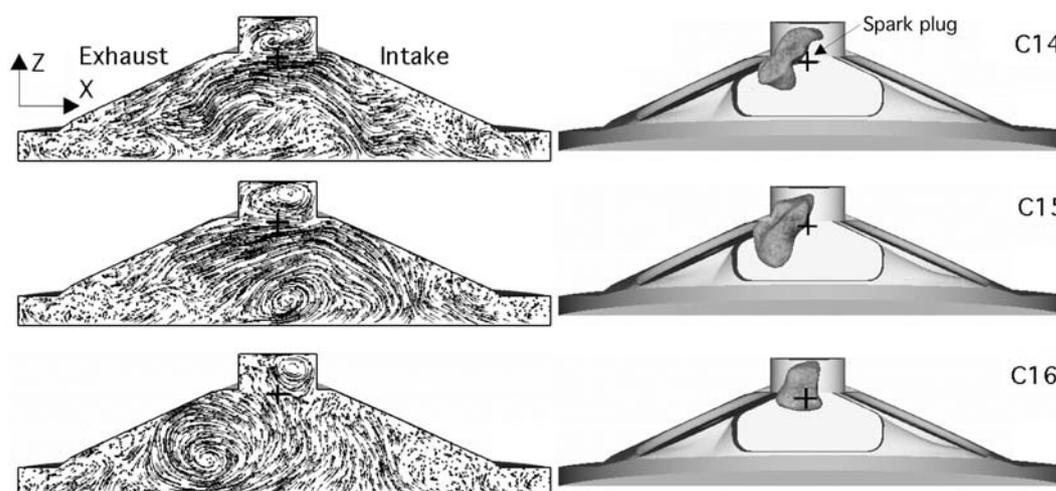


FIG. 10 - *Left* : velocity vector at spark timing in a cut plane through the spark plug. *Right* : iso-surface of progress variable $c = 0.5$, 5 CAD after ignition.

As mentioned in Section 4.3, phase 3 also has a non negligible influence on the flame propagation. Contrary to phase 1, the main factor which triggers variations during this phase is unclear. Indeed, during this phase, the flame propagation depends not only on several physical parameters (turbulence level, temperature, flame/wall interaction...) but also on the history of the flame during the first two phases (location of the flame front at CA10 in particular), making the direct comparison cycle to cycle delicate. In any case, it is worth reminding that this phase can only deflect the initial trend for some cycles and not completely revert it. In the present configuration, the variability in the velocity field at spark timing seems thus clearly the main triggering factor for combustion variability.

5 Conclusion

The use of an experimental database tailored for LES validation has confirmed the high potential of LES to accurately capture cyclic combustion variations in piston engines. The stable nature of the considered operating point (relative variation in peak pressure $< 5\%$) and the range of variations have been correctly predicted. Investigations of the sources of CCV have shown that, in the present case, variations in the velocity field at the spark plug control the initial growth of the flame and determine to a large extent the overall combustion duration. These large-scale aerodynamic variations manifest themselves through changes in the location of the tumble residual motion at spark timing from cycle to cycle. For cycles with a non-centered tumble motion, the initial flame kernel is driven in the spark plug cavity where it undergoes higher heat losses and benefits from lower turbulence activity, resulting in slower flame development. This initial trend may be partly deflected afterwards, during the fully turbulent propagation phase but this phenomenon is more complex to interpret, due to the large number of parameters involved and due to the different history of the initial flame developments from cycle to cycle.

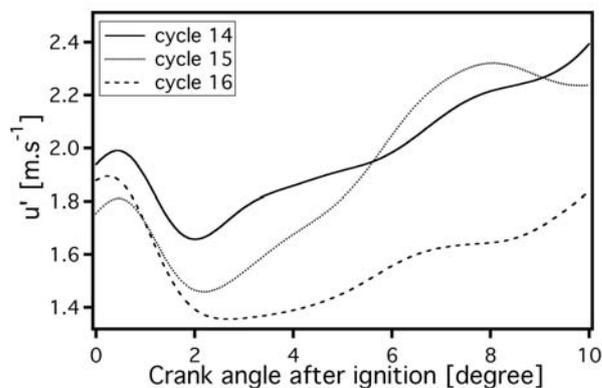


FIG. 11 - Evolution of the velocity fluctuations integrated over the flame surface.

cycle. Further investigations are also required to determine the source of the observed tumble center precession and its possible link with the intake stroke or the CCV in the intake ports.

Acknowledgments

The authors gratefully acknowledge the financial support provided by PSA Peugeot Citroën and Renault SAS in the framework of thesis researches. This work was granted access to the HPC resources of CINES under the allocation 2009-c2009026055 made by GENCI (Grand Equipement National de Calcul Intensif). The authors acknowledge the financial support by ANR under grant N.ANR-06-PDIT-007-01 SGEmac.

References

- [1] T. Lieuwen, V. Yang, Combustion Instabilities in Gas Turbine Engines : Operational Experience, Fundamental Mechanisms and Modeling, In Prog. in Astronautics and Aeronautics AIAA, vol. 210 (2005). Cité p. 2
- [2] Y. Huang, S. Wang, V. Yang, AIAA J., 44 (2006) 724–740. Cité p. 2
- [3] P. Schmitt, T. Poinso, B. Schuermans, K. Geigle, J. Fluid Mech. 570 (2007) 17–46. Cité p. 2, 4
- [4] A. Roux, L.Y.M. Gicquel, Y. Sommerer, T. Poinso, Combust. Flame 152 (1-2) (2008) 154–176. Cité p. 2
- [5] O. Vermorel, S. Richard, O. Colin, C. Angelberger, A. Benkenida, D. Veynante, Combust. Flame 156 (2009) 1525–1541. Cité p. 2, 3, 4
- [6] D. Goryntsev, A. Sadiki, M. Klein, J. Janicka, Proc. Combust. Inst. 32 (2009) 2759–2766. Cité p. 2, 4

- [7] S. Richard, O. Colin, O. Vermorel, C. Angelberger, A. Benkenida, D. Veynante, *Proc. Combust. Inst.* 31 (2) (2007) 3059–3066. Cité p. 2
- [8] C. Hasse, V. Sohm, B. Durst, *Comp. Fluids*, 39 (1) (2010) 25–48. Cité p. 2, 4
- [9] C. Lacour, C. Pera, B. Enaux, O. Vermorel, C. Angelberger, T. Poinso, in *Proc. of the 4th European Combustion Meeting*, Vienna, 2009. Cité p. 2, 6
- [10] V. Moureau, G. Lartigue, Y. Sommerer, C. Angelberger, O. Colin, T. Poinso, *J. Comput. Phys.* 202 (2) (2005) 710–736. Cité p. 3
- [11] P. Lax, B. Wendroff, *Commun. Pure Appl. Math.* 13 (1960) 217–237. Cité p. 3
- [12] J. Smagorinsky, *Monthly Weather Review* 91 (1963) 99–164. Cité p. 3
- [13] V. Moureau, I. Barton, C. Angelberger, T. Poinso, SAE Paper 2004-01-1995, 2004. Cité p. 3
- [14] V. Moureau, O. Vasilyev, C. Angelberger, T. Poinso, in : *Proc. of the Summer Program, Center for Turbulence Research, NASA AMES/Stanford Univ.*, 2004, pp. 157–168 Cité p. 3
- [15] T. Poinso, S. Lele, *J. Comput. Phys.* 101 (1) (1992) 104–129. Cité p. 3
- [16] B. Enaux, V. Granet, O. Vermorel, C. Lacour, L. Thobois, V. Dugué, T. Poinso, *Flow Turb. Combust.* (2010), accepted for publication. Cité p. 4, 7
- [17] S. Mendez, J.D. Eldredge, *J. Comput. Phys.* 228 (13) (2009) 4757–4772. Cité p. 4
- [18] M. Metghalchi, J. Keck, *Combust. Flame* 38 (1980) 143–154. Cité p. 5
- [19] S. Jerzembeck, N. Peters, P. Pepiot-Desjardins, H. Pitsch, *Combust. Flame*, 156(2) (2009) 292–301. Cité p. 5
- [20] G. P. Smith, D. M. Golden, M. Frenklach, N. W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. T. Bowman, R. K. Hanson, S. Song, W. C. Gardiner, V. V. Lissianski, Z. Qin. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/ Cité p. 5
- [21] D.G. Goodwin, *Cantera C++ Users Guide*, <http://sourceforge.net/projects/cantera> (2002). Cité p. 5
- [22] O. Colin, F. Ducros, D. Veynante, T. Poinso, *Phys. Fluids* 12 (7) (2000) 1843–1863. Cité p. 5, 11
- [23] G. Lacaze, B. Cuenot, T. Poinso, M. Oschwald, *Combust. Flame* 156 (2009) 1166–1180. Cité p. 5
- [24] G. Lacaze, E. Richardson, T. Poinso, *Combust. Flame* 156 (2009) 1993–2009. Cité p. 5
- [25] R. Maly, M. Vogel, *Proc. Combust. Inst.* 17 (1978) 821–831. Cité p. 5
- [26] R. Teets, J. Sell, *SAE Trans.* 97 (1988) 371–383. Cité p. 5
- [27] F. Nicoud, L. Benoit, C. Sensiau, T. Poinso, *AIAA J.*, 45 (2007) 426–441. Cité p. 7
- [28] N. Ozdor, M. Dulger, E. Sher, SAE Paper 950683, 1994. Cité p. 8, 10
- [29] M. B. Young, SAE Paper 810020, 1981. Cité p. 10

Simulation aux Grandes Échelles d'un moteur à allumage commandé - Évaluation des variabilités cycliques

La réduction des émissions de polluants et la diminution de la consommation sont deux challenges fortement liés auxquels les constructeurs automobiles doivent faire face tout en maintenant les performances des moteurs. Les nouvelles stratégies telle que la réduction de la cylindrée associée à une optimisation de la boucle d'air (forte suralimentation et recirculation de gaz brûlés) possèdent ce potentiel. Cependant elles affectent la stabilité du moteur en favorisant les variations cycle à cycle (VCC) qui correspondent à une fluctuation de la combustion d'un cycle sur l'autre. L'objectif de cette thèse est de développer une méthodologie s'appuyant sur la Simulation aux Grandes Échelles (SGE) capable de prédire les VCC d'un moteur à allumage commandé. Les prédictions sont validées grâce à une base de données expérimentale conçue à l'IFP qui leur est dédiée. Une approche graduelle est employée : l'outil numérique est tout d'abord évalué sur une configuration simplifiée de moteur à piston sans combustion, puis appliqué à un moteur à allumage commandé entraîné pour valider la prédiction de l'aérodynamique interne. Sur cette dernière configuration le couplage avec le modèle de combustion DTFLES est rajouté pour simuler deux points de fonctionnement réactifs. Chacune de ces simulations intègre un ou plusieurs points de modélisation (les tétraèdres en maillage mobile, les modèles de choc et d'allumage, et la cinétique chimique) au préalable testés sur des configurations académiques. Ce travail de recherche montre que l'approche SGE, dans un contexte de calcul massivement parallèle, est un outil prometteur dans l'étude des VCC d'un moteur à allumage commandé de conception récente.

Mots clefs : Moteur à allumage commandé, Simulation aux Grandes Échelles, Variations cycle à cycle, Combustion, Turbulence.

Large Eddy Simulation of a Spark-Ignition engine - Evaluation of cycle-to-cycle variations

A major challenge for the development of internal combustion engines is to improve fuel economy and to reduce pollutant emissions while maintaining or enhancing engine performances. New strategies using downsizing with high levels of exhaust gas recirculation have this potential, but can impact on the combustion stability and trigger high cycle-to-cycle variations (CCV). The objective of this thesis is to set a methodology based on Large Eddy Simulation (LES) to study CCV of a Spark-Ignition (SI) engine. A gradual approach is used : the numerical tool is first evaluated on a motored axisymmetric piston-cylinder assembly, and then applied on a motored SI engine to validate the in-cylinder aerodynamic predictions. On this last configuration, the coupling with the turbulent combustion model DTFLES is added to simulate two operating points of the indirect injection engine mode. Each of these simulations takes into account one or several modeling key points (tetrahedra with moving mesh, the modelings of shock and ignition, and chemical kinetics) previously tested in academic configurations. This research work shows that LES approach, in the context of massively parallel computing, can be used to study the CCV of a realistic SI engine.

Keywords : Spark-Ignition engine, Large Eddy Simulation, Cycle-to-cycle variations, Combustion, Turbulence.